



**VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ**

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ**

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

**ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ**

INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

**OPTIMALIZACE NÁVRHU ZOBRAZOVACÍHO  
SPEKTROMETRU S TRANSMISNÍ MŘÍŽKOU**

OPTIMIZATION OF TRANSMISSION GRATING SPECTROMETER DESIGN

**BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

BACHELOR'S THESIS

**AUTOR PRÁCE**

AUTHOR

**RÓBERT KLEŠTINEC**

**VEDOUCÍ PRÁCE**

SUPERVISOR

**Ing. JAN NOVOTNÝ, Ph.D.**

**BRNO 2021**

## **Abstrakt**

Táto práca sa zameriava na optimalizáciu návrhu optického zobrazovacieho spektrometru s transmisnou difrakčnou mriežkou určeného na spektrometriu laserom budeného plazmatu. V teoretickej časti popisuje spektrometriu a bližšie potom LIBS metódy.

Výsledkom práce je porovnanie spektrometru pred a po optimalizácií.

## **Summary**

This work focuses on optimization of a design of an optical imaging spectrometer with transmission diffraction grating intended for laser induced breakdown spectrometry. In theoretical part it describes spectrometry and then closely LIBS.

Result of the work is comparison of a spectrometer before and after optimization.

## **Klíčová slova**

Spektrometer, Spektrometria, Optický zobrazovací spektrometer, Transmisná mriežka, LIBS,

## **Keywords**

Spectrometer, Spectrometry, Optical imaging spectrometer, Transmission grating, LIBS,

KLEŠTINEC, R. *Optimalizace návrhu zobrazovacího spektrometru s transmisní mřížkou*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2021. 35 s. Vedoucí Ing. Jan Novotný, Ph.D.

Prehlasujem, že som predloženú bakalársku prácu vypracoval sám, s využitím uvedenej literatúry a podkladov, na základe konzultácií a pod vedením vedúceho bakalárskej práce.

Róbert Kleštinec



Touto cestou by sa sa chcel poďakovať svojmu vedúcemu pánovi Ing. Jan Novotnému PhD. za odborné rady a vedenie bakalárskej práce. Takisto ďakujem svojím rodičom a svojej priateľke.

Róbert Kleštinec

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Spektroskopia</b>	<b>4</b>
2.1	Spektroskopia ako taká . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Spektroskopia laserom budeného plazmatu</b>	<b>5</b>
3.1	Základy LIBS . . . . .	5
3.2	Mechanizmus plazmy . . . . .	6
3.3	Hlavné časti LIBS . . . . .	8
3.3.1	Laser . . . . .	8
3.3.2	Fokusačná optika . . . . .	8
3.4	Použitie LIBS . . . . .	9
3.4.1	Archeológia . . . . .	9
3.4.2	Biomedicína . . . . .	9
3.4.3	Detekcia bakteriálnych infekcií u hmyzu . . . . .	9
3.4.4	Priemysel . . . . .	9
3.4.5	Prieskum Marsu . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Optický zobrazovací spektrometer</b>	<b>11</b>
4.1	Optické aberácie . . . . .	11
4.1.1	Seidlove aberácie . . . . .	12
4.2	Geometrické usporiadanie spektrometrov . . . . .	15
4.2.1	Ebert-Fastie konfigurácia . . . . .	15
4.2.2	Littrow konfigurácia . . . . .	16
4.2.3	Pfundt konfigurácia . . . . .	17
4.2.4	Čzerny-Turner konfigurácia . . . . .	18
4.3	Difrakcia . . . . .	19
4.3.1	Reflexná mriežka . . . . .	19
4.3.2	Transmisná mriežka . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Optimalizácia spektrometru</b>	<b>21</b>
5.1	Pôvodný spektrometer . . . . .	21
5.1.1	Zrkadlá . . . . .	22
5.1.2	Difrakčná mriežka . . . . .	23
5.1.3	Detektor . . . . .	23
5.1.4	Simulácia pôvodného spektrometru v Zemaxe . . . . .	23
5.2	Optimalizácia . . . . .	26
5.3	Spektrometer po optimalizácii . . . . .	27
<b>6</b>	<b>Mechanický návrh</b>	<b>30</b>
6.1	Optická doska . . . . .	30
6.2	Úchyty zrkadiel . . . . .	30
6.3	Upevnenie difračnej mriežky . . . . .	30
<b>7</b>	<b>Záver</b>	<b>31</b>



# 1. Úvod

Analytická metóda laserom budeného plazmatu LIBS sa stáva čím ďalej tým viac obľúbenejšia v priemysle ale aj vo výskume. Jej hlavným prvkom je spektrometer ktorého optimalizáciou sa bude táto práca zaoberať.

Pôvodný návrh vznikol ako reakcia na nedostatok komerčne dostupných spektrometrov s transmisnou mriežkou, ktorá poskytuje vyššiu efektivitu difrakcie a teda vyššiu citlivosť na detekovaný signál.

Tento návrh bolo ale potrebné optimalizovať pre zlepšenie rozlíšenia a práve tomu sa táto práca venuje.

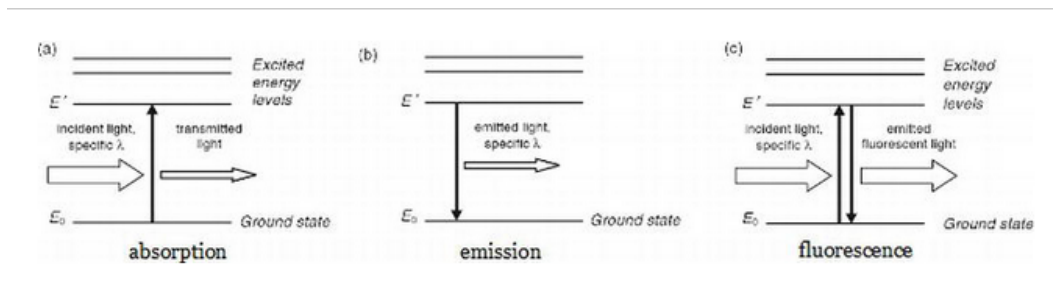


## 2. Spektroskopia

### 2.1. Spektroskopia ako taká

Spektroskopia je štúdium absorpcie a emisie elektromagnetického žiarenia hmotou. V poslednej dobe sa ale definícia rozšírila o zahrnutie štúdia interakcie medzi časticami ako sú elektróny, protóny a ióny. Spektrálna analýza zohrávala dôležitú úlohu vo vývoji fundamentálnych teórií vo fyzike, ako sú napríklad kvantová teória, špeciálna a všeobecná teória relativity a kvantová elektrodynamika. Spektroskopia sa používa ako nástroj pre štúdium štruktúry atómov a molekúl. Veľký počet vlnových dĺžok emitovaných systémom umožňuje vyšetriť ich štruktúry do detailu, vrátane elektrónovej konfigurácie základných a excitovaných stavov. Spektroskopia takisto umožňuje precíznu analytickú metódu pre zistenie chemickej kompozície vyšetrovaného vzorku. Pri štandardnej spektrálnej analýze je možno odhaliť prvok ktorý je zastúpený len zopár atómami pri veľmi nízkej koncentrácii. [1,2]

Každá látka má charakteristickú atómovú štruktúru, s malým, pozitívne nabitým jadrom obkoleseným množstvom elektrónov, daných počtu protónov v jadre. Elektróny sú usporiadané do orbitálov a ak je danému elektrónu dodané presné kvantum energie je mu umožnené dostať sa na vyššiu energetickú hladinu. Táto energia je získaná zo stretnutia s inými atómami, ako pri AES (atomic emission spectroscopy), z fotónov zo žiarenia pri AFS (atomic fluorescence spectroscopy) a AAS (atomic absorption spectroscopy) alebo z vysoko-energetických elektrónov pri XRF (X-ray fluorescence). Ak je teda dodaná presná hodnota energie medzi dvoma energiovými stavmi ( $\Delta E$ ), tak sa neutrálny atóm dostane zo svojho energeticky najvýhodnejšieho stavu, stavu s najnižšou energiou do prvého excitovaného stavu. Každý atóm ma tento rozdiel energií, medzi základným a excitovanými stavmi, presne daný a špecifický pre daný atóm.[3]



Obr. 2.1: Absorpcia a emisia energie realizovanej svetlom, prevzaté z [3]

Energia  $\Delta E$  sa pre väčšinu atómov nachádza v ultrafialovej až viditeľnej časti spektra. Energiu fotónov získame z nasledujúcej rovnice

$$E = hf \quad (2.1)$$

kde  $h$  je Planckova konštanta a  $f$  je frekvencia vlnenia korešpondujúca pre daný fotón. Prechod medzi vlnovou dĺžkou a frekvenciou je v nasledujúcej rovnici.

$$\lambda = v f \quad (2.2)$$

Kde  $\lambda$  je vlnová dĺžka a  $v$  je rýchlosť šírenia vlny v prostredí. Čo nám teda dáva finálny vzťah[3]:

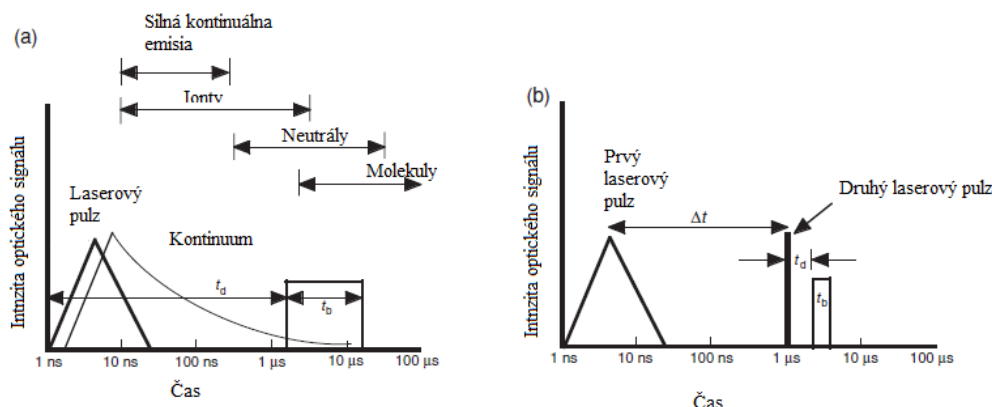
$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.3)$$

## 3. Spektroskopia laserom budeného plazmatu

### 3.1. Základy LIBS

Spektroskopia laserom budeného plazmatu (L.I.B.S.- Laser Induced breakdown spectroscopy) zahŕňa analýzu svetelnej emisie, ktorá vzniká keď je pulzujúca laserova radiácia fokusovaná na malú plošku na skúmanej vzorke. Výsledkom je vysoko-teplotná a vysoko-elektrónová plazma v ktorej sa materiál vzorky rozpadne, vyparí, atomizuje, a čiastočne sa ionizuje. Aj keď sa používa viacero typov laserov ( $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $KrF$ ,  $XeCl$ ), LIBS najčastejšie používa Nd-YAG laser, operujúci na základnej vlnovej dĺžke 1064 nm, ktorý pulzuje v nanosekundových intervaloch a je fokusovaný na povrch vzorku tak aby lokálna hustota výkonu dosiahla stovky megawattov/ $cm^2$ . Keď laserové dávky dopadajú na povrch vzorku, pod-množstvo vzorky sa vyparí a nevyhnutne disociuje na vytvorenie vysoko-teplotnej plazmy. Behom tvorenia plazmy elektróny interagujú a rekombinujú s iontami na uvoľnenie energie naprieč širokým spektrom v rozmedzí od 200-980 nm.[4]

Plazmatická emisia vyprodukovaná počas LIBSu pozostáva z dvoch častí- široké a intenzívne kontinuálne vyžarovanie (Breemstlungova emisia) a neskôr, po vychladnutí na bod kedy sú neutrálne atómy v excitovanom stave, diskretnými vyžarovacími pásmi (rekombinačná emisia) tvorená atómami, iontami a molekulárnymi fragmentami. Aby žiarenie z kontinuálneho žiarenia interferovalo s detekciou oveľa slabšieho emisného žiarenia trasovaných prvkov, sa merania LIBS vykonávajú v tzv. časovo rozlíšenej detekcii. Týmto spôsobom silné kontinuálne (biele) svetlo v začiatkoch môže byť odstránené z merania zapnutím detektoru po oslabnutí bieleho svetla ale atomické emisné žiarenie je ešte stále prítomné, ktoré je pre danú látku špecifické vlnovou dĺžkou. Dôležitým parameterom pre časovo rozlíšenú detekciu je čas  $t_d$ , ktorý udáva čas medzi tvorením plazmy a začiatkom pozorovania plazmového svetla, čas  $t_b$  je perióda cez ktorú sa zaznamenáva svetelné žiarenie.[4]



Obr. 3.1: a) časové intervaly po vytvorení plazmy počas ktorej rôzne druhy žiarenia dominujú. Štvorec reprezentuje čas počas ktorého sa žiarenie detekuje.  $t_d$  je časové omeškanie a  $t_b$  je časová šírka pulzu. RSS experiment b) časové intervaly pre double-pulse RSP kde  $\Delta t$  je čas medzi pulzami. Prevzaté a upravené z [1]

### 3.2. MECHANIZMUS PLAZMY

Kontinuálna a diskrétna emisia môže byť rozložená časovo aj spektrálne. Zberom a separáciou žiarenia emitovaného mikroplazmou cez časovú a spektrálnu analýzu je možné vyprodukovať škálu intenzít spektra obsahujúce emisné čiary korešpondujúce atómom nachádzajúcim sa v mikroplazme. Pretože všetky atómami emitujú v rozmedzí 200-980 nm je ich možno identifikovať v danej škále. Kvantitatívne zastúpenie látky vo vzorke je možné odhaliť, meraním intenzity zachyteného svetla na špecifickej vlnovej dĺžke. Nakoľko je intenzita emisnej čiary počas prechodu medzi stavmi energie sa riadi vzťahom:

$$I_{ij} = \frac{\Omega \hbar c N g_i A_{ij}}{4\pi \lambda_{ij} Z(T)} e^{\frac{-E_i}{kT}} \quad (3.1)$$

kde  $I_{ij}$  je intenzita emisnej čiary pre prechod medzi  $i$  a  $j$  energiovým stavom,  $i$  a  $j$  sú indexy vyššieho a nižšieho kvantového stavu,  $\Omega$  je vyžarovací uhol pre plazmovú emisiu,  $\hbar$  je redukovaná Plancková konštanta,  $c$  je rýchlosť svetla,  $N$  je počet voľných atómov skúmaného prvku v plazme,  $g_i$  je štatistická váha kvantového stavu  $i$ ,  $A_{ij}$  je pravdepodobnosť prechodu pre spontánnu emisiu z  $i$  na  $j$ ,  $\lambda_{ij}$  je vlnová dĺžka danej emisnej čiary prvku ktorý skúmame,  $Z(T)$  je partričná suma kvantového stavu,  $T$  je teplota v Kelvinoch pri ktorej dochádza k excitácií elektrónov a  $E_i$  je energiová úroveň excitácie elektrónov.[4]

### 3.2. Mechanizmus plazmy

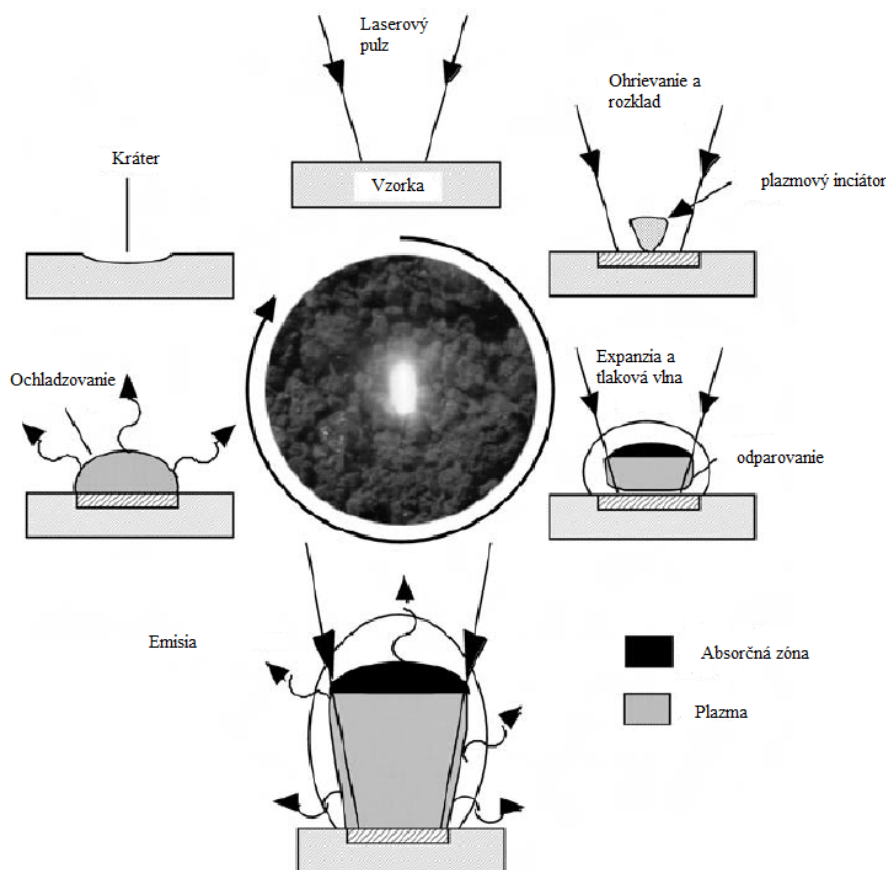
Plazma sa vytvorí na veľmi obmedzenom priestore tak že iba veľmi malé množstvo vzorku (pg-ng) je aktívnych pri každom vytvorení mikroplazmy. Typický LIBS kráter má rozmery 100  $\mu m$  na šírku a je hlboký 10-20  $\mu m$ , čo robí z LIBS výbornú metódu na horizontálne a aj hĺbkové profilovanie na krátke vzdialenosti alebo analýzu tekutín a nečistôt v pevných látkach. Všetky komponenty pre prístroj môžu byť vytvorené malé a odolné pre použitie v teréne a LIBS senzor môže byť použitý buď na blízko alebo aj na vzdialenosť niekoľkých metrov.

Väčšina LIBS meraní je sprostredkovaných použitím techniky RSS (repetitive single spark) v ktorej je séria jednotlivých laserových výbojov vyslaná na vzorku pri frekvencii 10 Hz. V niektorých prípadoch, pre zlepšenie detekcie, je možné použiť RSP (repetitive single pair) techniku. RSP je séria dvoch krátko za sebou idúcich pulzov (väčšinou je časový rozdiel 1-10  $\mu s$ ) použitých na ožiarenie vzorku. Časovú schému možno vidieť na obrázku 3.1. [1]

Životný cyklus plazmy na povrchu vzorky je znázornený na obrázku 3.2 K rozkladu optickou excitáciou vedú dva kroky. Prvý spočíva vo vygenerovaní zopár voľných elektrónov ktoré slúžia ako prvotné receptory energie kolíziou s fotónmi a neutrálnymi atómami. Druhý je lavína ionizácií vo fokálnej oblasti. Z klasickej fyziky, voľný elektrón je urýchlený elektrickým poľom spojené s optickým pulzom v časovej oblasti medzi stretmi, ktoré slúžia na vybudenie termickej elektrónovej energie. Ako energia elektrónov rastie, strety produkujú ionizáciu, uvoľňujú sa ďalšie elektróny, absorbuje sa viac energie a lavínový efekt je na svete. Z fotónového hľadiska sa absorpcia vyskytuje kvôli silnému bremsstrahlungovému efektu. Hranica pre rozklad je väčšinou špecifikovaný ako minimálna intenzita žiarenia potrebná k dosiahnutiu plazmy.

Po rozklade plazma expanduje do všetkých smerov od fokálnej oblasti, najrýchlejšia expanzia je ale smerom ku fokusačnej šošovke laseru, lebo práve odtiaľto prišla optická

### 3. SPEKTROSKOPIA LASEROM BUDENÉHO PLAZMATU



Obr. 3.2: Schéma životného cyklu laserovej ablácie vzorky

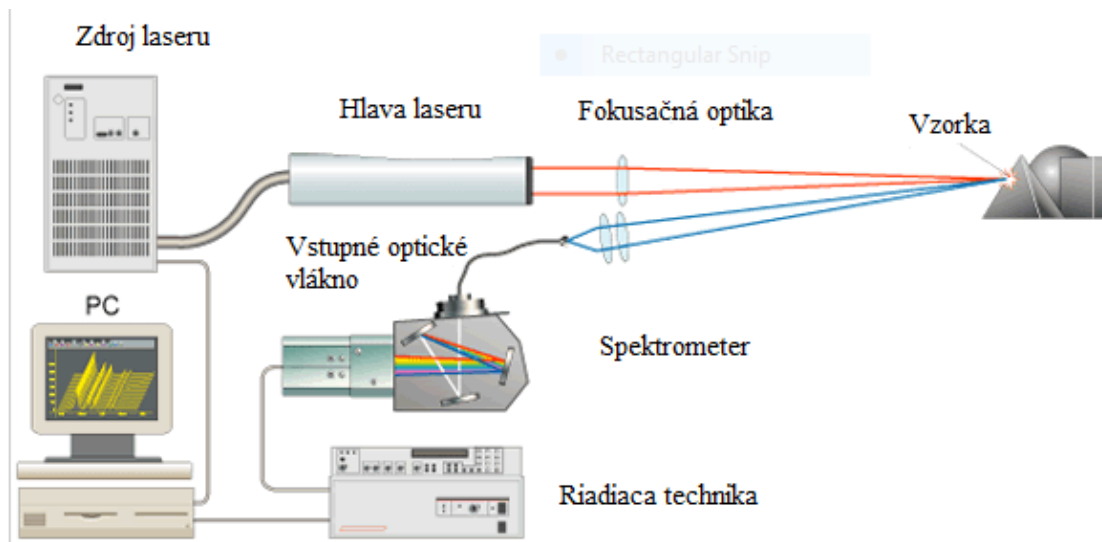
energia, čo má na svedomí vytvorenie hruškovitého tvaru. Počiatočná rýchlosť expanzie môže dosahovať až  $10^5$  m/s. Zvuk ktorý je možno počuť je spôsobený tlakovou vlnou prichádzajúcou z fokálnej oblasti. [1]

Medzi iniciáciou a rozkladom plazmy, prejde mnohými prechodovými javmi ako rastie a interaguje s prostredím. Tri modely ktoré najlepšie popisujú šírenie a expanziu sú laser-supported combustion(LSC), laser-supported detonation(LSD) a laser-supported radiations(LSR) waves. Líšia sa v predikcii v priehľadnosti a prenose energie plazmy v okolitom prostredí. Pri žiareníach s nízkou intenzitou, aké sa vyskytujú pri LIBS experimentoch, modely ktoré najlepšie vystihujú realitu sú LSC a LSD. Plazma a jej hranica s okolitou atmosférou sú natolko priepustné aby dovolili prichádzajúcemu laserovému žiareniu preniknúť.

Počas expanznej fázy plazma emituje žiarenie ktorí je hlavným predmetom skúmania. Ochladzuje sa rozkladá ako sa častice zbavujú energie rôznymi spôsobmi. Elektróny a ióny rekombinujú na tvorbu neutrálnych atómov a z niektorých vznikajú molekuly. Energia uniká žiarením a vedením.[1]

## 3.3. Hlavné časti LIBS

Hlavné časti LIBS experimentu sú vidno na obrázku 3.3. Vysoko-energetický laser je pomocou zaostovacej optiky nasmerovaný na vzorku na ktorej sa laserom indukuje plazma. Spektrometer možno považovať za najdôležitejšiu časť celého procesu. Má za úlohu difraktovať svetlo, zozbierané optickým káblom, z ktorého získame tzv. spektrálny odtlačok. Potom je svetlo detekované použitím na svetlo citlivým detektorom a vyhodnotené na PC.



Obr. 3.3: Schéma hlavných častí LIBS. Prevzaté a upravené z [8]

### 3.3.1. Laser

Parametre laseru ktoré ovplyvňujú LIBS sú: (1)pulzná energia (2)kadencia pulzov (3) mód paprsku (4)veľkosť a váha (5) požiadavky na chladenie a spotrebu elektrickej energie.

### 3.3.2. Fokusačná optika

Jednou z hlavných výhod metódy LIBS je jej relatívna nedeštruktívnosť. Preto je dôležité, aby laser pri dopade na vzorku a vytvorení plazmy zanechal na povrchu čo najmenšiu možnú ablačnú stopu. Na veľkosti stopy sa podieľajú hlavne dva parametre, a to dĺžka pulzu a priemer laserového zväzku v rovine povrchu vzorky. Ideálnym riešením by bola fokusácia lúča do jedného bodu (okrem zmenšenia stopy aj zvýšenie merného výkonu pulzu vztiahnutého na plochu). Tomuto však bránia chyby optických sústav, preto je snaha optimalizovať fokusačnú optiku tak, aby priemer stopy nebol väčší ako priemer prvého difrakčného maxima, ktoré nezávisí od kvality optiky, a teda je hraničným limitom, na ktorý sa je možné dostať[10]

## 3.4. Použitie LIBS

LIBS má mnoho atribútov prečo je populárny nástroj na chemickú analýzu, obzvlášť s možnosťou použitia či už v laboratóriu alebo ako prenosný prístroj slúžiaci na analýzu vzoriek priamo v teréne na geochemickú, prieskumnú štúdiu prostredia. LIBS je relatívne jednoduchý a priamočiari, ponúka odozvu v reálnom čase a simultánnu mnoho-zložkovú analýzu. Nie je potrebná žiadna predpríprava vzoriek, čo znižuje komplexnosť analýzy a eliminuje možnosť straty alebo pridania nežiadúcej prímiesy pri nesprávnom zaobchádzaní alebo skladovaním alebo vzájomnou kontamináciou vzoriek pri transporte alebo komplikovanou prípravou na laboratórnu analýzu.

### 3.4.1. Archeológia

Vzorky s archeologickou alebo kultúrnou hodnotou môžu byť náročné na analýzu. Tieto vzorky nemôžu byť poškodené alebo premiestnené na analýzu. Toto je veľmi jednoduché vyriešiť prenosným LIBS systémom, LIBS nepotrebuje priamy kontakt so vzorkom takže sa nepoškodia vzácne vzorky. Aj keď sa laserovom ablatuje určité nepatrné množstvo vzorku, kráter je mikroskopický a nerozlíšiteľným voľným okom. LIBS je použiteľné pre prakticky všetky materiály, napríklad keramika, mramor, kosti alebo kovy. Väčšinou sa analýzou snaží určiť zloženie vzorku k tomu aby bolo možné určiť jeho vek a funguje aj na analýzu kostí k určeniu zloženia stravy. Pri maľbách je možno pomocou určenia zloženia rozhosnúť o autenticosti fresiek a iných diel.[11]

### 3.4.2. Biomedicína

LIBS sa začalo používať v tomto odvetví len nedávno a to na určenie zloženia kostí, tekutín a tkanív. je možné ho použiť na zistenie prebytku alebo nedostatku minerálov v kostiach, zuboch, nechtoch, je možné ho použiť na odhalenie rakoviny a odpalovanie tumorov. Analýza vzoriek rastlín zvykne byť komplikovaná, pretože si vyžadujú náročnú prípravu vzorku založenú na vstrebávaní kyselín pre dosiahnutie kvalitných výsledkov. Celý tento proces je u LIBS nepotrebný.

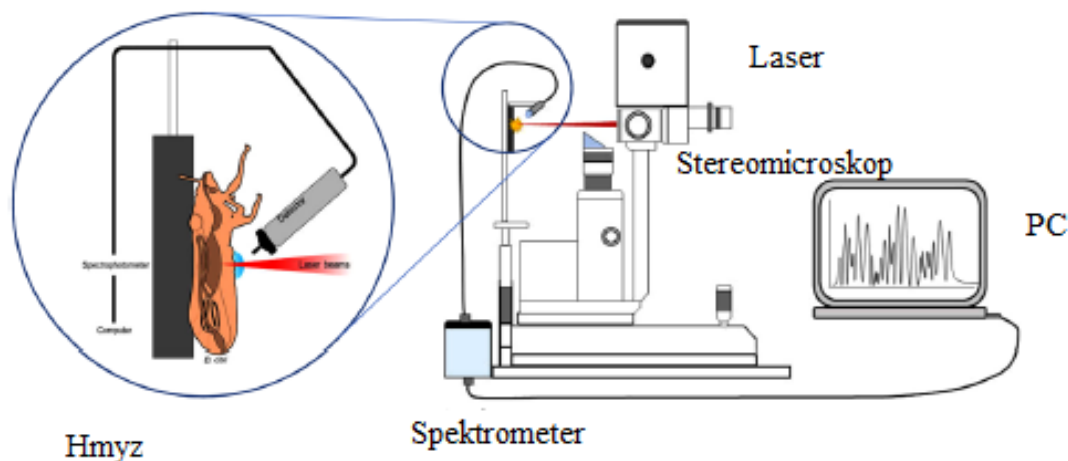
### 3.4.3. Detekcia bakteriálnych infekcií u hmyzu

Štúdia z roku 2019 odhalila že LIBS možno použiť aj na detekciu infekcií,čo by mohlo priniesť posun pri skúmaní ľudsko-hmyzích chorôb ako je zika a malária.

### 3.4.4. Priemysel

LIBS je zakomponované v mnohých priemyselných procesoch po mnoho rokov ako rýchly analytický nástroj na kontrolu procesu výroby. Navyše umožňuje prácu na dlhé vzdialenosti takže je vhodný na analýzu nebezpečných vzoriek alebo na prácu v drsných podmienkach. Ku príkladu možno uviesť detekciu výbušnín dokonca na stopových množstvách. V jadrovom priemysle je efekt radioaktívnych látok na ľudský organizmus dobre známy, LIBS umožňuje toto riziko eliminovať. V metalurgii, v zlievarňach dosahuje finálny produkt vysokých teplôt. LIBS umožňuje bezpečnú analýzu zliatin a kontrolu prítomností

### 3.4. POUŽITIE LIBS



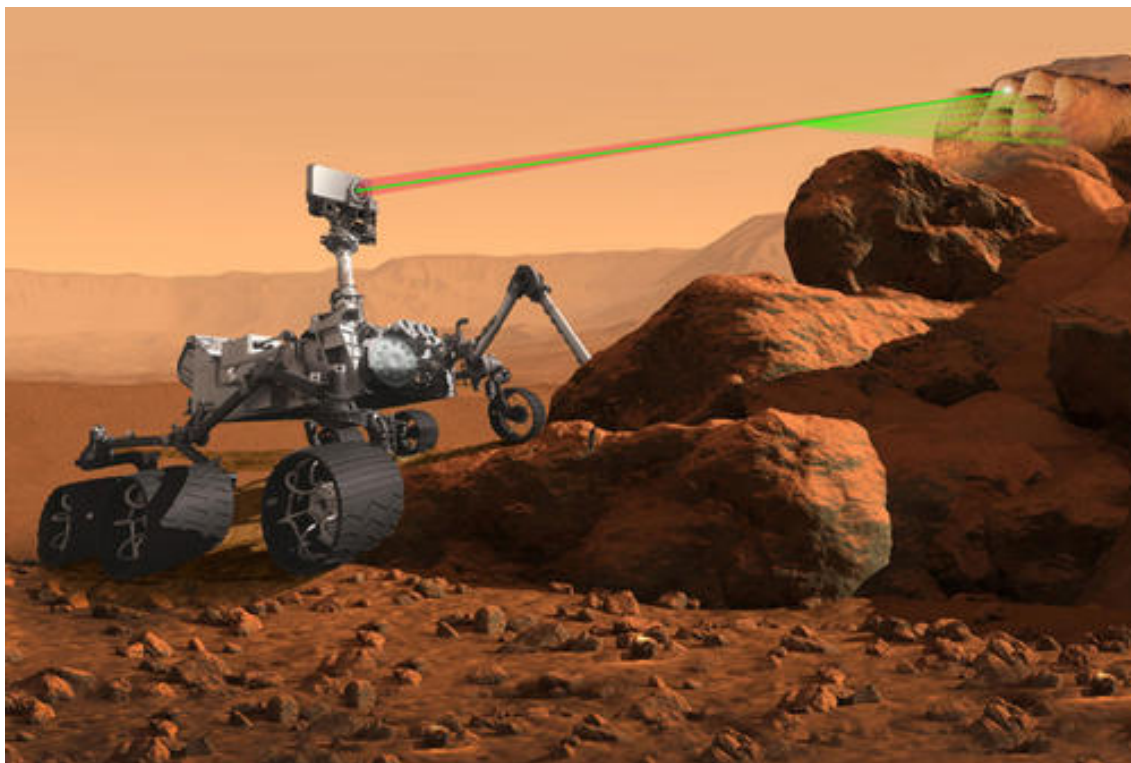
Obr. 3.4: Schéma skúmania baktérií na hmyze

nečistôt. V enviromentálnom priemysle je ho možné použiť na odhalenie toxických látok na skládkach.

#### 3.4.5. Prieskum Marsu

Misia americkej NASA v roku 2020 úspešne dostavila robot Perseverance na povrch Marsu. Na tomto vozítku sa nachádza SuperCam, čo je prístroj na analýzu vzorkov povrchu marsu. Skladá sa z LIBS Chem cam, ktorá bola už úspešne použitá na roveri Curiosity. Jedná sa o LIBS používajúci 1064 nm laser schopný analyzovať vzorky na vzdialenosť až 7 metrov. Navyše tu je aj Super Cam ktorá využíva Ramanovu spektroskopiu schopnú vyšetriť materiál na vzdialenosť 12 metrov. Na záver tu je kamera s vysokým rozlíšením ktorá zaznamenáva snímky vzoriek na detekcií. Súbor dát teda poskytuje merania schopné analyzovať geochemické a minerálne zloženie vzoriek marťanského povrchu.[12]





Obr. 3.5: Robot Perseverance s LIBS na marse, prevzaté z [12]

## 4. Optický zobrazovací spektrometer

### 4.1. Optické aberácie

Keď paralelný zväzok svetla putuje cez centrovaný optický systém, tak doputujú do korešpondujúceho paraxiálneho bodu kde vytvoria obraz. jeho poloha zodpovedá *Gausovej zobrazovacej rovnici*:

$$\frac{1}{v} - \frac{1}{u} = \frac{1}{f}$$

kde  $v$  je obrazová vzdialenosť,  $u$  je predmetová vzdialenosť a  $f$  je ohnisková vzdialenosť systému. Toto platí za použitia znamienkovej konvencie pri ktorej, naľavo od systému je záporne znamienko a napravo kladné. V reálnom systéme ale paprsky putujúce ďalej od stredu nedopadajú do rovnakých miest ako im priradené paraxiálne paprsky. Paprsky ktoré mŕňajú okraje pupil a apertúr sa nazývajú marginálne paprsky a rozdielom medzi nimi a paraxiálnymi sa zaoberá aberačná teória. Jej snahou je redukovať tieto vady na nulu alebo aspoň na minimum. Jedná sa o nelineárnu teóriu, rôzne príčiny aberácií spolu súvisia, my ale si ale situáciu zjednodušíme posudzovaním jednotlivých aberácií tak že ostatné budeme považovať za neprítomné. [8]

Korekciu dosahujeme dvoma hlavnými spôsobmi. Prvý je zmena tvaru pre šošovky a zrkadlá, bez zmeny ich optickej mohutnosti  $(n - 1)c$ . Druhý je umiestnenie clôn medzi optické elementy nakoľko aberácie závisia od vzdialenosti od optickej osi. [8]



## 4.1. OPTICKÉ ABERÁCIE

### 4.1.1. Seidlove aberácie

V Gausovskej optike je použitá aproximácia  $\sin\theta \cong \theta$ ,  $\cos\theta \cong 1$ . Z toho môžeme získať pozíciu obrazu, zväčšenie, a podobne. Toto sa považuje za teóriu nultého rádu. Seidlova teória, občas nazývana teória prvého rádu, zavádza tieto aproximácie :  $\sin\theta \cong -\frac{\theta^3}{6}$ ,  $\cos\theta \cong 1 - \frac{\theta^2}{2}$  a  $\tan\theta \cong \theta + \frac{\theta^3}{3}$ . Seidlova teória nie je presná ale je dostačujúca ako začiatkový bod pre trasovanie paprskov. [8]

#### Aberácie nultého rádu

**Chyba zaostrenia** Zväzok lúčov pretínajúci optickú osu v Gausovskom obraze prechádzajú všetky cez jeden bod, tento bod je ale buď za alebo pred ohniskovou rovinou. Táto aberácia sa dá jednoducho napraviť posunutím obrazovej roviny do správnej polohy.[8]

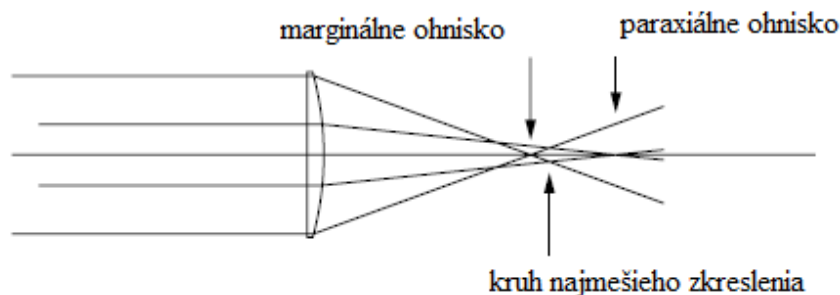
#### Aberácie prvého rádu

**sférická aberácia** Táto vada je vložená do systému použitím optických elementov so sférickými povrchmi. Ak je Gausovský obraz bod na ose, tak marginálne paprsky pretínajú osu pred a za týmto bodom. Vzdialenosť na ose od paraxiálneho obrazu k marginálnemu sa nazýva *longitudiálna sférická aberácia*. Pre šošovky a zrkadlá ohniskovej dĺžky je pre ňu vzorec:

$$\delta_{sfe} = \mathbf{B}y^2 f$$

kde  $y$  je semi-apertúra (polomer jednoduchej šošovky),  $f$  je ohnisková dĺžka.  $\mathbf{B}$  je *koefficient sférickej aberácie* a jeho hodnota závisí na ohnutí šošovky, pre parabolické zrkadlá sa rovná 0. Všeobecne je užitočnejšie vedieť priemer takzvaného *kruh najmenšieho zkreslenia*, čo je priemer najmenšieho spotu ktorý možno dosiahnuť správnym nastavením, jeho predpis je :

$$\delta_{colc} = \mathbf{B} \frac{y^3}{2}$$



Obr. 4.1: Sférická aberácia spolu s kruhom najmenšieho zkreslenia

U šošoviek je možno korigovať sférickú vadu achromatickým doubletom. Táto šošovka pozostáva z dvoch častí z rôzneho druhu skla, ktoré sú spolu natesno spojené. Dôležité je skombinovať ich tak aby ich ohniskové vzdialenosti boli pre dve vlnové dĺžky boli rovnaké.[8]

#### 4. OPTICKÝ ZOBRAZOVACÍ SPEKTROMETER

**Koma** Často sa nazývajú aj ako veľký Satan optického dizajnu, lebo keď sa podarí eliminovať komu tak sa aj ostatné aberácie zredukujú. Koma závisí na tzv. *polnom uhle* hlavného paprsku zväzku a preto sa zaoberáme naklonenými zväzkami kde hlavný paprsok je naklonený k optickej osi pod uhlom  $\theta$ . [8]

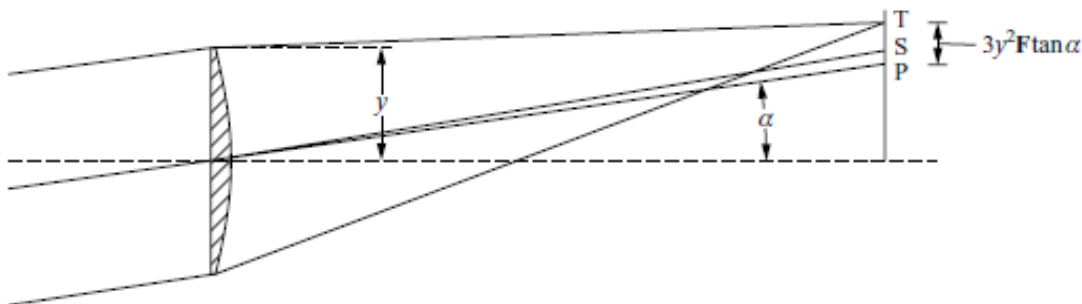
V naklonených zväzkoch paraxiálne paprsky doputujú do paraxiálneho ohniska. Ak nie je prítomná žiadna sférická vada, tak marginálne paprsky konvergujú k tej istej ohniskovej rovine ale dopadnú do iných bodov. Preto sú dva páry marginálnych paprskov dôležité pre definovanie množstva komy.[8]

**Tangenciálna koma** Keď dva marginálne paprsky stretnú na rovine v bode kde nedopadne paraxiálne paprsok, tak kolmá vzdialenosť od paraxiálneho paprsku sa nazýva *tangenciálna koma*. Jej hodnota sa vypočíta podľa:

$$\Delta_{coma} = 3y^2 F \tan \theta$$

kde  $F$  je koeficient komy.

**Sagitálna koma** V jednoduchom prípade dva marginálne paprsky z koncov priemeru kolmého na rovinu hlavného paprsku dopadnú na bod medzi paraxiálnym ohniskom a bodom kde sa meridionálne marginálne paprsky stretávajú. Táto vzdialenosť od paraxiálneho ohniska je jedna tretina zo vzdialenosti k meridionálnemu ohnisku marginálnych paprskov, a podľa symetrie je to na priamke ktorá ich spája. Ostatné páry marginálnych paprskov vytvoria kruh, ktorého priemer určujú meridionálne a sagitálne ohnisko. Paprskové páry z medzikružia šošovky vytvoria kruhy iného priemeru čo vytvorí trojuholníkovú komu s vrcholom v paraxiálnom ohnisku s vrcholovým uhlom 60 deg. *Intenzita svetla je rovnomerná, slabšia na vonkajších krajoch a vytvorená komou z ktorej sa zovpreber*



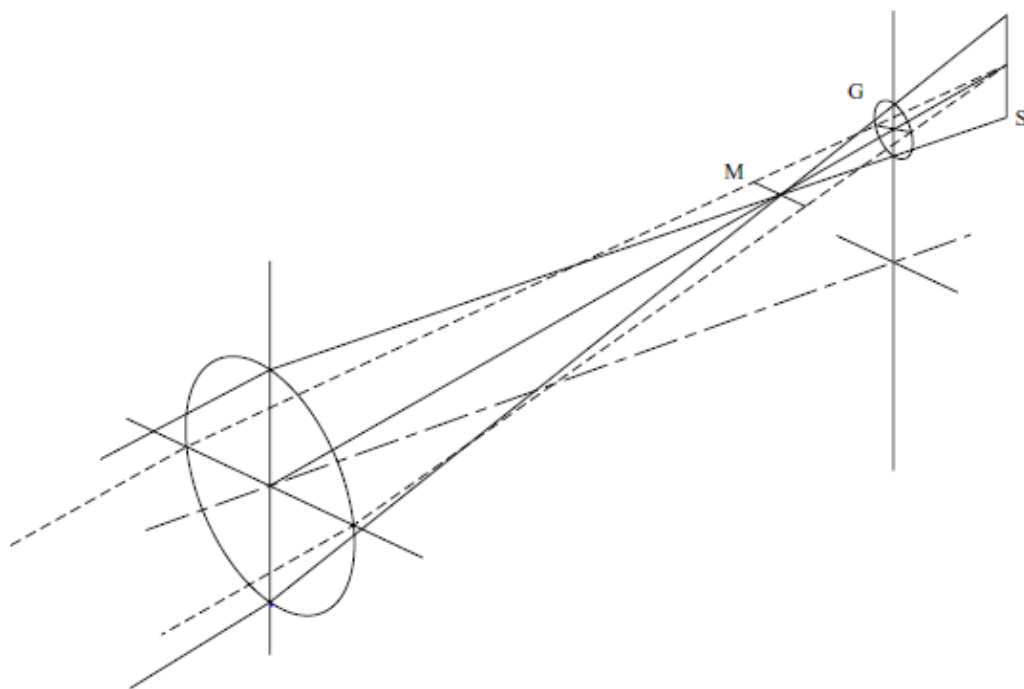
Obr. 4.2: Meriditionálna a tangenciálna koma šošovky, pri absencii ostatných aberácií. Marginálne paprsky sa stretávajú v tangenciálnom obrazovom bode T. Bod P označuje miesto dopadu paraxiálnych paprskov. Koma sa potom považuje ako rozdiel týchto dvoch bodov. Marginálne paprsky kolmé k tomuto diagramu sa stretávajú v sagitálnom ohnisku, bod S.  $PS=1/3PT$

**Astigmatizmus** Táto aberácia je úzko spätá so zakrivením pola a väčšinou sa spolu aj hodnotia. Podobne ako  $B$  a  $F$  pre sférickú vadu a komu, tak aj  $C$  ktoré súvisí s astigmatizmom a  $D$  ktoré mizne keď je zakrivenie nulové. [8]

## 4.1. OPTICKÉ ABERÁCIE

Uvažujme vzdialený predmet tvaru kola vo forme sústredných kružníc a radiálnych čiar na bielom pozadí, vycentrovaný a kolmý s optickou osou ktorý zobrazujeme naším systémom. Ak je astigmatizmus prítomný tak máme dva ohniskové roviny, obe sférické. Jedna zobrazuje zaostrené kružnice a druhá radiálne čiar. Oba povrchy majú spoločnú dotyčnicu v paraxiálnom ohnisku.

Ani v jednom z prípadov však bod objektu nekorešponduje s bodom obrazu. Prstencový zväzok paprskov bude najprv konvergovať k vytvoreniu krátkej čiary, ktorá po zobrazení pretne optickú osu. Potom zväzok vytvorí ďalšiu kolmú k predošlej. Toto je kladný astigmatizmus. Pozícia prvej čiary sa nachádza na sagitálnej ohniskovej rovine, ramená kola, a meridiónej alebo tangenciálnej roviny zobrazia kruh. Toto sa nemusí odohrať v popísanom poradí, astigmatizmus rovnako ako koma môže byť negatívny. U spektrometrov je to práve tangenciálna rovina ktorá nás hlavne zaujíma nakoľko sa práve tam fokusujú spektrálne čiary.[8]

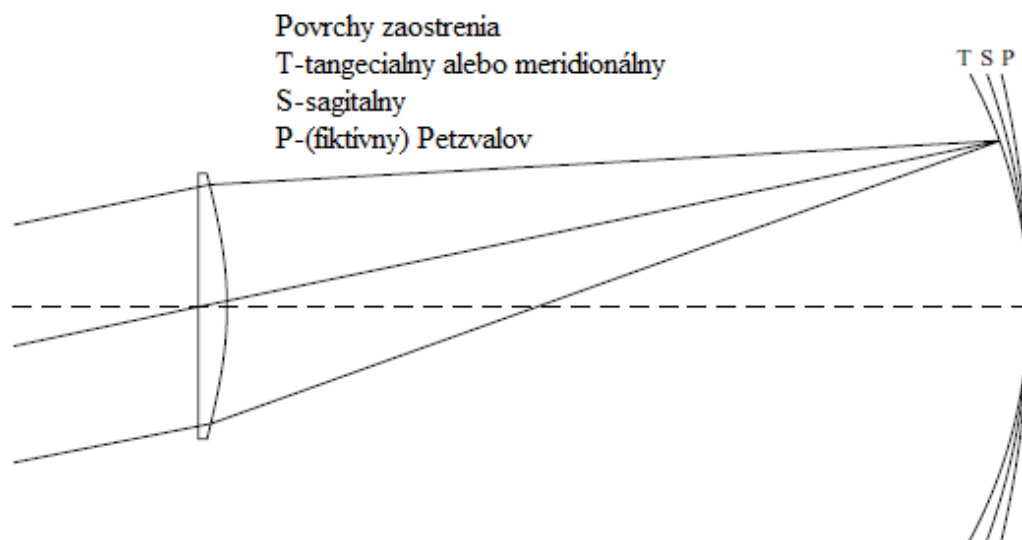


Obr. 4.3: Astigmatizmus. Pri absencii komy sa sagitálny a tangenciálny paprsok stretávajú v iných bodoch. Tangenciálne na čiare M a sagitálne na čiare S. Medzi týmito ohniskami leží, kruh najmešieho zkreslenia G .

Astigmatizmus je rovnako ako koma, aberáciou pola a mizne na optickej ose. Na to aby existovala musí byť prítomné zakrivenie pola (to ale môže existovať bez astigmatizmu). Zakrivenie jedného pola môže byť nulové. V spektrometri využívajúcom difrakčnú mriežku, tangenciálne pole môže byť rovné na štrbine, bude zobrazená v rôznych farbách na rovinu. Obraz bodu štrbiny je krátka čiara ležiaca v smere spektra, nevšimne si ho teda pokiaľ je štrbina veľmi dlhá a rozlíšenie veľmi vysoké. [8]

**Astigmatizmus a zakrivenie pola** Zakrivenie pola samotné znamená že obraz scény v nekonečne nebude ležať na rovine ale na sfére ktorej stred pretína optickú osu a pretína ju paraxiálnom ohnisku. Zakrivenie pola je teda definované polomerom tejto sféry. Táto

sféra môže byť konvexná alebo konkávna k šošovke, teda polomer môže byť kladný alebo záporný. Napríklad u fotografie je snaha dosiahnuť túto hodnotu na nekonečno aby sa vytvorila rovina na CCD čipe. [8]



Obr. 4.4: Zakrivenie pola. Je neoddeliteľné od astigmatizmu nakoľko sa sagitálne a tangenciálne smery zobrazujú na rôzne sférické povrchy, ak je neprítomný astigmatizmus tak splývajú do jedného tzv Petzvalova plocha.

## 4.2. Geometrické usporiadanie spektrometrov

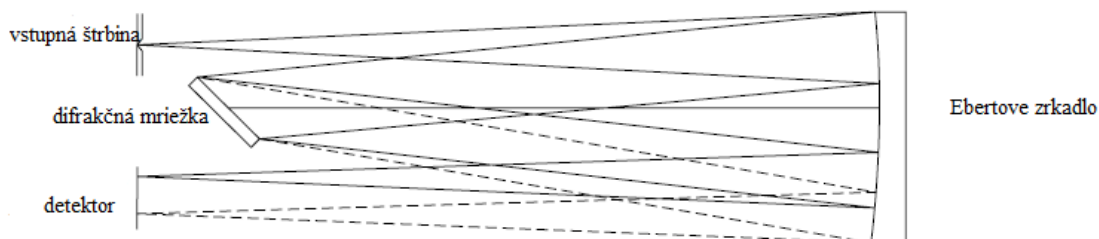
Od začiatkov skladania optických spektrometrov až do 19. storočia pozostávala konfigurácia spektroskopov zo vstupnej štrbiny, kolimačného prvku, disperzného prvku a fokusačného prvku. Bol to Hermann Ebert, nemecký inovátor spektrometrov v 19. storočí, ktorý nadviazal na prácu Henryho Augusta Rowlanda, ktorý produkoval difrakčné mriežky určené na výskum, ktorý navrhol achromatický spektrograf používajúci jedno sférické zrkadlo, ktoré slúžilo ako kolimátor a aj ako fokusačný člen. Tento návrh umožnil odstránenie nežiadúcich longitudiálnych disperzií, typických pre šošovkový systém. Toto zistenie sa zdalo byť komunitou odignorované až po znovuobjavení Wiliamom Georgom Fastiem, zatiaľ čo Černý a Turner nahradili šošovky sférickými zrkadlami. Joseph Johann von Littrow podobne prispel vývoju použitím jedného parabolického alebo sférického zrkadla, ktoré poskytovalo rozlíšenie ktoré bolo obmedzené až difrakciou. [8]

### 4.2.1. Ebert-Fastie konfigurácia

Jedným zo spoločných znakov tejto konfigurácie, ktorú zdieľa s Černý-Turner, je čiastočná korekcia tangenciálnej komy, čo ponecháva sférickú a astigmatizmus ako dve hlavné aberácie na korigáciu. Správny výber pozícií pre mriežku zaisťuje ploché meridiálne pole. Astigmatizmus je tolerovaný lebo len meridiálne zaostrenie je požadované a rozptyl je ignorovaný nakoľko spektrálna disperzia je vo všetkých prípadoch nelineárna. Aj keď je táto konfigurácia schopná vysokého rozlíšenia pri pomerne veľkej numerickej apertúre, ob-

## 4.2. GEOMETRICKÉ USPORIADANIE SPEKTROMETROV

medzenia dané jediným zrkadlom robí optické usporiadanie Ebertovej konfigurácie príliš náročné a bolo vo veľa prípadoch nahradané Čzerny-Turner usporiadaním pre komerčné aplikácie. Používajú sa dve časti zrkadla takže by nemalo dôjsť k prekriženiu medzi dopadajúcim a odrazeným zväzkom paprskov.



Obr. 4.5: Konfigurácia Ebert-Fastie. Prvá achromatická metóda pre spektrograf s vysokým rozlíšením.

### 4.2.2. Littrow konfigurácia

Hlavné použitie tejto konfigurácie je ako monochromátor, ktorý poskytuje obraz bez optických chýb pre krátku priamu štrbinu. Preto je použité mimoosové parabolické zrkadlo. Pre udržanie čo najmenšieho poľa je použité usporiadanie štrbiny a detektoru nad sebou, prípadne výstupnej štrbiny pre monochromátor. Nakoľko je prítomná plná koma tak paraboloid neposkytuje žiadnu výhodu oproti Čzerny-Turner konfigurácií pre spektrogrify. Pre monochromátory je však možnosť vysokého rozlíšenia ak je vstupná štrbina malá (2 percentá fokusačnej vzdialenosti) a zakrivenie rovného obrazu.[8]

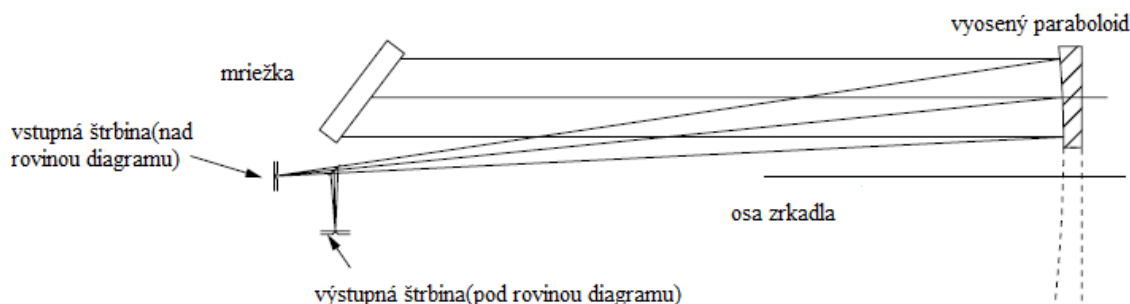
Ako monochromátor, je rozlíšenie rovnaké keď sú drážky mriežky paralelné k rovine obrázku ... a mriežka je otočená namiesto nahnutia. Disperzia je potom kolmá k rovine obrázka a spektrum sa tvorí vo výstupnej štrbine. Toto poskytuje určité výhody ale žiadnu takú ktorá by odôvodňovala uprednostnenie pred Čzerny-Turner konfiguráciou v prípade spektrogratu. Hlavným nedostatkom je potreba neosového parabolického zrkadla, ktoré je veľké a ťažké alebo bolo odrezané z väčšieho kusu. Potom existuje možnosť rozptylu na týchto rezoch čo môže zapríčiniť stratu rozlišovacej schopnosti. [8]

Nezvyčajnou aplikáciou Littrow konfigurácie je monochromatické zobrazenie rozšíreného objektu, na toto sú väčšinou použité interferenčné filtre. Nakoľko je systém stigamtický pri ose paraboly, dvojrozmerné rozlíšenie je možné a otáčaním zrkadla je možné posunúť svetelný zdroj, napríklad Slnko, za vstupnú štrbinu zatiaľ čo druhá časť zrkadla odráža výstupnú štrbinu cez pole kamery alebo teleskopu. Množstvo pomocnej optiky použitím zrkadiel a rotujúcich sklenných kociek umožňuje dvojrozmerné rozlíšenie objektu v ľubovolnej vlnovej dĺžke. Pomocou trasovania paprskov bolo zistené že možno dosiahnuť spektrálne rozlíšenia až 0,05 pri použití 2 metrových ohniskových dĺžok, s 75mm širokou difrakčnou mriežkou a  $15\mu\text{m}$  širokými štrbinami.[8]

Podobným spôsobom je možné pozmeniť aj Čzerny-turner monochromator na spektrometer so spektrálnym rozsahom na zopár angstrémov. Rotujúci štvorcový hranol dlhý ako výstupná štrbina paralelná s ňou môže byť umiestená pred štrbinu(v spektrometri),

#### 4. OPTICKÝ ZOBRAZOVACÍ SPEKTROMETER

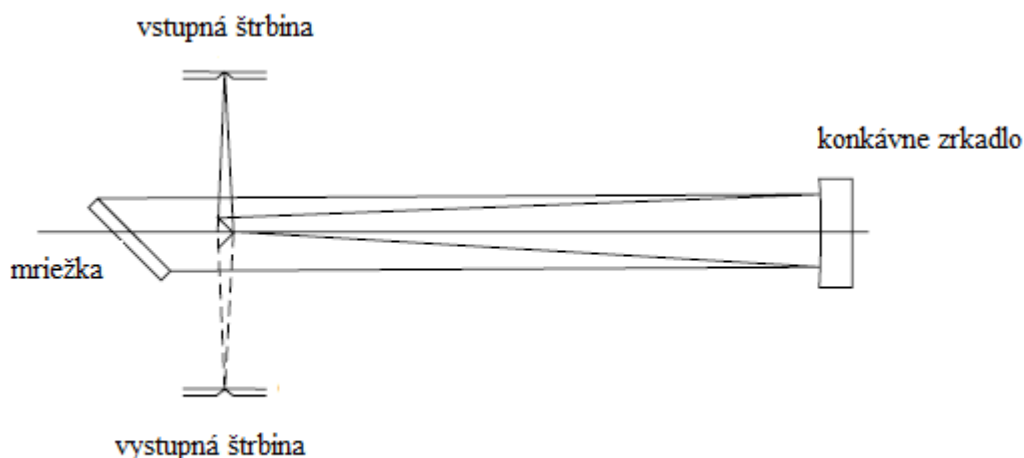
s elektrickým motorom s rýchlo rotujúcim hranolom. Toto rozmaže obraz vstupnej štrbiny a odhalí lokálnu štruktúru monochromatickej emisnej čiary multipletu. Pri sledovaní výstupu detektoru na monitore ukáže zmenený v reálnom čase pre pásovú štruktúru, napríklad, ako sa mení teplota zdroja alebo keď sa aplikuje externé magnetické pole. Takto možno sledovať absorpciu zelenej čiary pre ortuť.[8]



Obr. 4.6: Konfigurácia Littrow.

#### 4.2.3. Pfundt konfigurácia

Jedná sa o variant Ebert-Fastieho konfigurácie kde mimosové aberácie sú redukované pomocou Newtonských zrkadiel. Ako spektrograf nemá priveľmi praktické využitie kvôli úzkemu polu a nevyhnutne malému spektrálnemu rozsahu. Je to ale možná aleternatíva k Littrow konfigurácií keď je potrebný malý astigmatizmus v čiarovej analýze. Možno použiť Čzerny-Turner zrkadlá pre úplne vymazanie astigmatizmu. Rovnako ako Littrow sa jedná o stigmatické zobrazovanie. S parabolickými zrkadlami je nulová sférická vada. Praktický limit je ako vždy zakrivený obraz čiary. Obrovskou nevýhodou ale zostáva nevyhnutné prekrytie mriežky zrkadlom čo ma za následok pokles svetelnosti. [8]



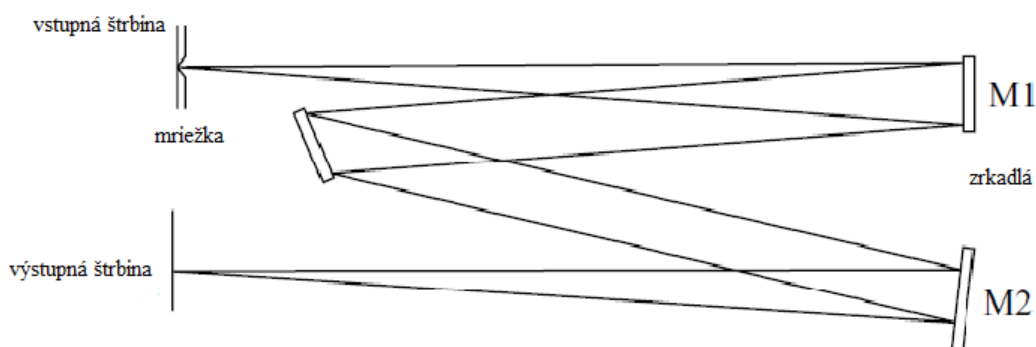
Obr. 4.7: Konfigurácia Pfundt. Užila si svoj čas na výslní ako monochromátor.

### 4.2.4. Čzerny-Turner konfigurácia

Táto konfigurácia, ktorá je zobrazená na obrázku ... je zďaleka najpopulárnejším rozvrhnutím pre reflexné spektrogrfy. Dvojica zrkadiel je použitá mimosovo od hlavných paprskov čím je nevyhnutne zavedená koma. Keby sa namiesto mriežky nachádzalo rovinné zrkadlo odrážajúce svetlo na druhé zrkadlo tak koma by sa úplne vykorigovala, nechávajúc iba astigmatizmus a sférickú vadu vo fokusovanom zväzku. Po difrakcii je ale kolimovaný zväzok buď širší alebo užší ako zväzok prichádzajúci, ak je teda systém symetrický, ako mnohé skoré spektrogrfy boli, koma je len čiastočne korigovaná. Výsledky sú ale pre clonové čísla  $f/12$ - $f/16$  uspokojujúce pre väčšinu použití.[8]

V Čzerny-Turner spektrografoch je natočenie mriežky väčšinou k vstupnej strane. Toto je základné opatrenie pretože výstupný zväzok je užší a umožňuje väčšiemu spektru byť fokusované zo zrkadla (M2). Rôzne alternatívne usporiadania, ako umiestenie štrbiny, mriežkovania, a smerov disperzie sú kolmé na rovinu optiky, boli odskúšané pre Ebert-Fabie a aj Čzerny-Turner konfigurácie, ale neposkytujú žiadne markantné zlepšenie, trasovanie paprskov dokonca rýchlo odhalí pridané aberácie navyše. [8]

So štandardným rozvrhnutím je viac voľných designových parametrov, ktoré sú nevyhnutné pre zabezpečenie najlepšieho rozlíšenia. Všeobecným pravidlom je držať vyosenia čo najmenšie a konzistentné so časťou spektra, ktorú chceme zaznamenať.



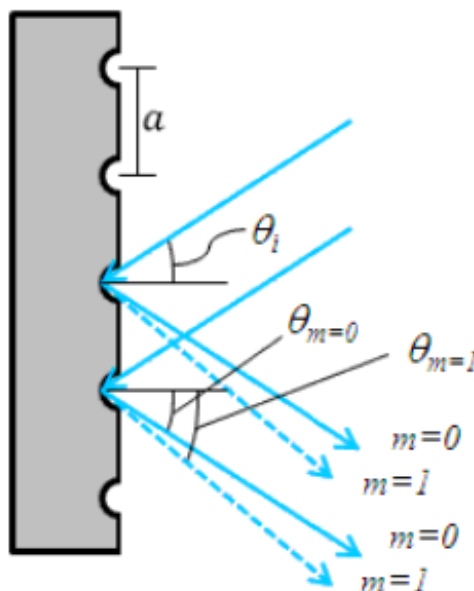
Obr. 4.8: Konfigurácia Čzerny-Turner. Často konštruovaná so symetrickým rozvrhnutím, kde stred mriežky je na polceste medzi štrbinami.

### 4.3. Difrakcia

Keď monochromatické svetlo dopadá na povrch difrakčnej mriežky, tak je rozptýlené do diskretných smerov. Difrakčná mriežka sa dá predstaviť ako súbor vrypov do materiálu, kde každý jeden vryp funguje ako veľmi malý, pásový zdroj svetla. Svetlo rozptýlené jednotlivými vrypmi sa skladá na vytvorenie viacerých difraktovaných vlnoplôch. Princíp fungovania difrakčnej mriežky spočíva v tom že existuje špecifický súbor diskretných uhlov, ktoré kvôli danému rozloženiu vrypov, vytvorí konštruktívnu interferenciu. Jej princíp je založený na podmienke že rozdiel dráh prejde jednotlivými paprskami je rovný celočíselnému násobku vlnovej dĺžky svetla. Všetky ostatné vlnové dĺžky budú deštruktívnu interferenciu vyrušené.[14]

#### 4.3.1. Reflexná mriežka

Jedna z najčastejšie používaných mriežok je reflexná. Reflexná mriežka je tradične vyrábaná depozíciou kovového pláštá na dosku a následným vygravírovaním vrypov. Takisto môžu byť vyrobené z epoxidu alebo plastu otláčaním výrobnnej predlohy.



Obr. 4.9: Reflexná mriežka upravené a prevzaté z [14]

Vo všetkých prípadoch je svetlo odrazené od povrchu v rôznych smeroch korešpondujúc rôznym rádom a vlnovým dĺžkam. Za pomoci geometrie v obrázku je možno prísť k rovnici pre reflexnú mriežku:

$$a [\sin(\theta_m) + \sin(\theta_i)] = m\lambda \quad (4.1)$$

kde  $a$  je vzdialenosť vrypov v mriežke,  $\theta_m$  je difrakčný uhol ktorý je záporný,  $\theta_i$  je vstupný uhol ktorý je kladný, ak sú prichádzajúce a difraktované paprsky na opačných stranách normály povrchu mriežky. Ak sú oba paprsky na rovnakých stranách tak sú oba uhly považované za kladné. Oba uhly sa merali od normály povrchu mriežky na strane kde sa nachádzajú im priradené paprsky  $m$  je difrakčný rád a  $\lambda$  je vlnová dĺžka.[14]



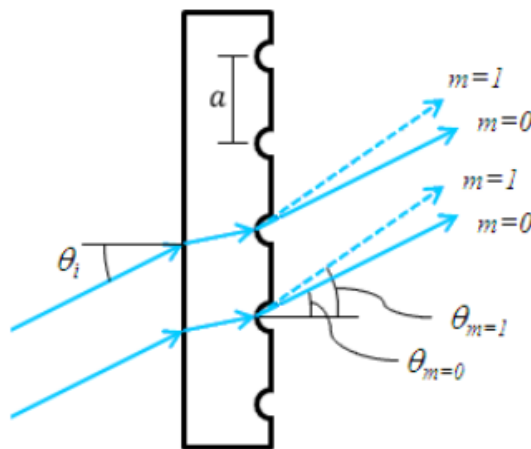
### 4.3. DIFRAKCIA

#### 4.3.2. Transmisná mriežka

Tento typ je vytvorený vyškrabovaním alebo leptaním priehľadného materiálu s periodicky opakujúcou sa štruktúrou, ktorá vytvára oblasti kde sa svetlo môže rozptýliť. Transmisná mriežka na obrázku pozostáva z opakujúcich sa úzkych vrypov oddelených vzdialenosťou  $a$ . Rovnica pre transmisnú mriežku:

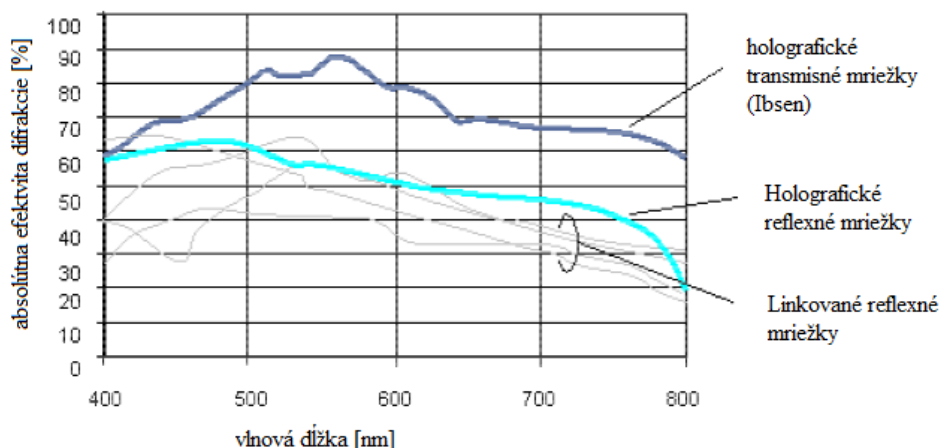
$$a [\sin(\theta_m) - \sin(\theta_i)] = m\lambda \quad (4.2)$$

Transmisná aj reflexná mriežka trpia faktom, že pre nultý rád nie je prítomná žiadna difrakcia a prejavujú sa len ako priehľadný respektíve odrazivý povrch. Z rovnice ... a s podmienkou  $\theta_i = \theta_m$ , vidíme že jediné riešenie je pre  $m = 0$ , nezávisle na vlnovej dĺžke alebo vzdialenosti vrypov v difrakčnej mriežke. Pod touto podmienkou nezískavame zo systému žiadnu informáciu o vlnovej dĺžke a všetko svetlo je stratené na transmisiu alebo odraz.



Obr. 4.10: Transmisná mriežka, upravené a prevzaté z [14]

Ako vidno na obrázku 4.11 efektivita transmisných mriežok je vyššia oproti mriežkam reflexným. V oblasti viditeľného svetla je efektivita transmisných mriežok vyššia o 20 % oproti holografickým reflexným mriežkam a 40 % oproti linkovaným reflexným mriežkam.[14]



Obr. 4.11: Porovnanie účinnosti difrakčných mriežok

## 5. Optimalizácia spektrometru

Úlohou tejto bakalárskej práce je optimalizácia optického zobrazovacieho spektrometru, ktorý bol navrhnutý Ing. Janom Malinom na prácu v laboratóriách Ústavu fyzikálneho inžinierstva VUT v Brne.

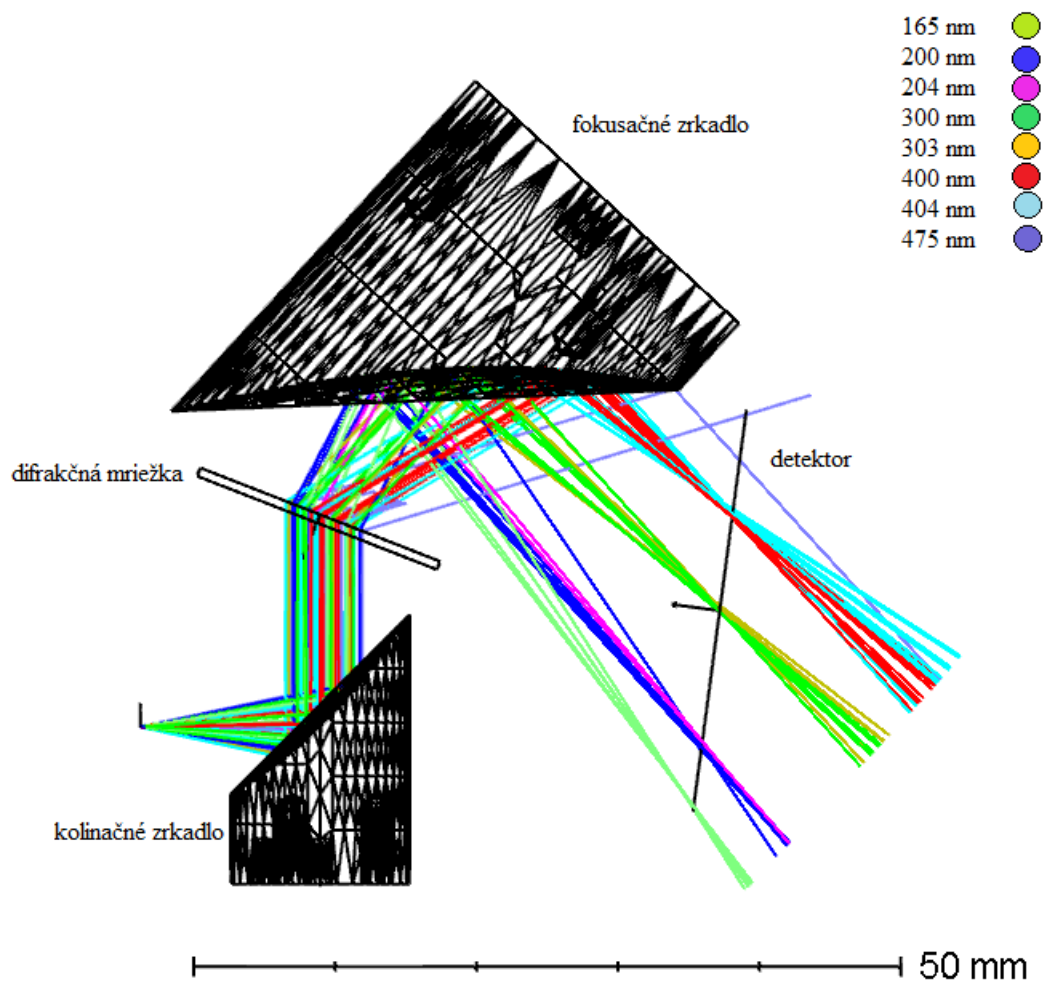
### 5.1. Pôvodný spektrometer

Postup návrhu sledoval návod od firmy Ibsen Photonics[13], ktorý v ôsmich krokoch popisuje výpočet parametrov, ktoré definujú spektrometer. V úvode návrhu je nutné si zadefinovať základné parametre. Tie boli zvolené ako:

- Vstupná štrbina:  $w_s = 50 \mu\text{m}$
- Numerická apertúra:  $NA = 0,22$
- Maximálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{max} = 400 \text{ nm}$
- Minimálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{min} = 200 \text{ nm}$
- Centrálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{cen} = 300 \text{ nm}$
- Výchylka:  $\phi = 0^\circ$
- Perióda mriežky:  $G = 2421 \text{ čiar/mm}$
- Difrakčný rád:  $k = 1$
- Veľkosť obrazu na čipe:  $w_s = 100 \mu\text{m}$
- Zväčšenie :  $M = 2$

Zvolila sa konfigurácia Littrow ( $\phi = 0^\circ$ ) pre prvý difrakčný rád. Celková výchylka  $\phi$  je rozdiel uhlov  $\alpha$ , uhol dopadu svetla na mriežku a  $\beta$ , difrakčný uhol centrálnej vlnovej dĺžky. Po vykonaní výpočtov ktoré budú rozobraté v ďalšej časti boli zvolené komponenty.

## 5.1. PÔVODNÝ SPEKTROMETER



Obr. 5.1: Zobrazenie spektrometru v nesequenčnom móde Zemax, upravené a prevzaté z [6]

### 5.1.1. Zrkadlá

Na kolimáciu prichádzajúceho svetla a jeho následnú fokusáciu po difrakcií na mriežke boli použité parabolické zrkadlá od firmy Edmund Optics z rady TECHSPEC. Jedná sa o hliníkové, mimoosové, parabolické zrkadlá a sú k dispozícii s chrániacim hliníkovým povlakom a ponúkajú vysokú efektivitu odrazivosti v rozsahu 200-700 nm.[19,20]

#### Kolimačné zrkadlo

Označenie: #37-264

Efektívna ohnisková vzdialenosť: 12,70 mm

Polomer: 12,70 mm

Off-set uhol: 90 °

#### Fokusačné zrkadlo

Označenie: #37-232

Efektívna ohnisková vzdialenosť: 25,40 mm

Polomer: 25,40 mm

Off-set uhol: 90 °

### 5.1.2. Difrakčná mriežka

Nakoľko pracujeme v UV oblasti elektromagnetického spektra bola požadovaná vysoká efektivita v tejto oblasti. Ďalšou požiadavkou bola kompaktnosť spektrometru takže potrebujeme rýchly lom svetla na krátku vzdialenosť, to nám zaistí vysoká hustota čiar.[17]

Označenie: FSTG-XUV2421-921

Funkčná plocha: 8,1 mm x 8,1 mm

Celková plocha: 9,1 mm x 9,1 mm

Hustota čiar:  $G=2421$  čiar/mm

Optimalizované pre vlnové dĺžky: 190-437 nm

Uhol dopadu  $\alpha$  pre strednú vlnovú dĺžku  $\lambda_{cen}$  dostaneme zo vzorca:

$$\alpha = \sin^{-1} \left( \frac{\lambda_c G}{2 \cos \frac{\phi}{2}} \right) - \frac{\phi}{2} = \sin^{-1} \left( \frac{300 \cdot 10^{-6} \cdot 2421}{2 \cdot \cos \frac{0}{2}} \right) - \frac{0}{2} = 21,294^\circ \quad (5.1)$$

Potom z Littrow konfigurácie vyplýva:

$$\phi = \alpha - \beta \rightarrow \beta = \alpha - \phi = 21,294^\circ \quad (5.2)$$

### 5.1.3. Detektor

Nakoľko je LIBS časovo náročná, ako bolo spomínané v časti 3.1, bol zvolený Back-thinned CCD čip, ktorý obsahuje funkciu elektronickej záverky a zabudovanému chladeniu bude udržiavať optimálnu teplotu.[18]

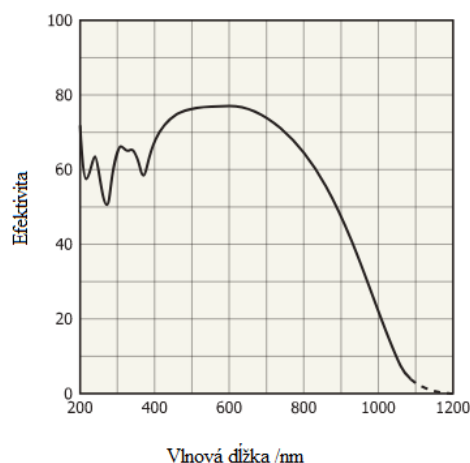
Veľkosť čipu: 28.672 x 1 mm

Počet pixelov: 2048

Veľkosť pixelov: 14 x 1000  $\mu\text{m}$

Vysoká citlivosť pre vlnové dĺžky: 200-1100 nm

Maximálna rýchlosť čítania: 10 MHz



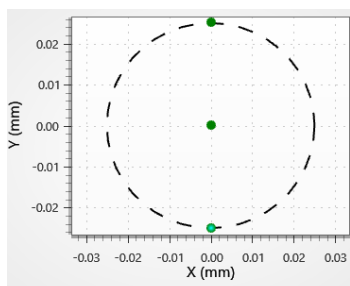
Obr. 5.2: Efektivita detektoru v závislosti na vlnovej dĺžke, prevzaté a upravené z [18]

### 5.1.4. Simulácia pôvodného spektrometru v Zemaxe

Ako výstupné nastavenie Zemaxu som zvolil nasimulovanie štrbiny pomocou nastavenia Fields. Jedná sa o 50  $\mu\text{m}$  štrbinu, kde som použil dve polia vzdialené 25  $\mu\text{m}$  od osi.

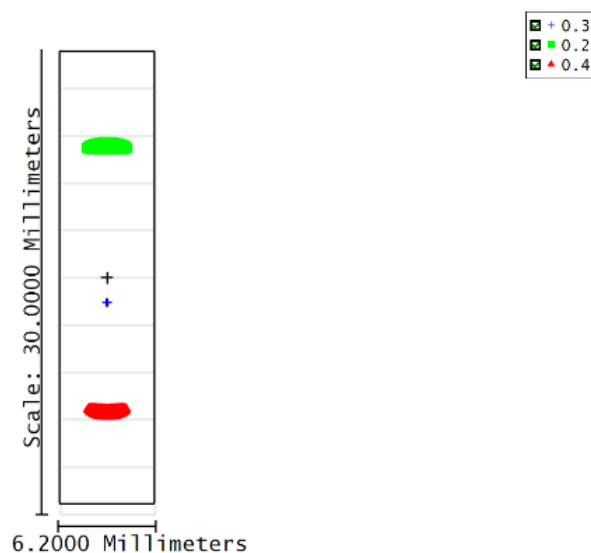
### 5.1. PÔVODNÝ SPEKTROMETER

Vlnové dĺžky som nastavil na 200 nm, 300 nm a 400 nm.

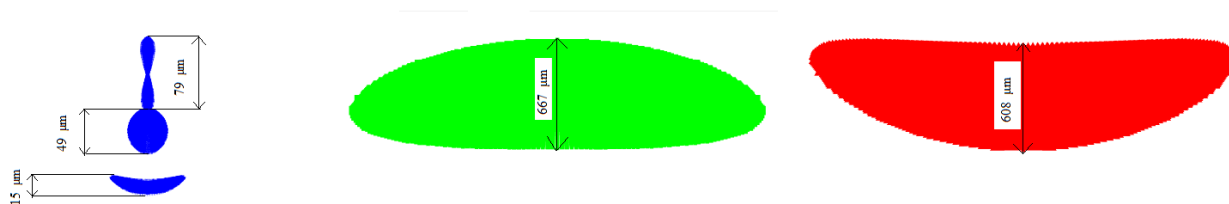


Obr. 5.3: Simulácia vstupnej štrbiny v Zemaxe o priemere 50  $\mu\text{m}$

Ako je vidno na obrázku 5.3 spot pre vlnovú dĺžku 300 nm je naozaj malý oproti krajným vlnovým dĺžkam. Nakoľko používame detektor, ktorý má zoradené pixely do smeru y nás analýza obrazu v smere x nás nebude zaujímať.

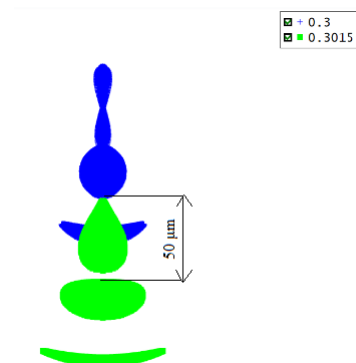


Obr. 5.4: Footprint diagram



Obr. 5.5: Veľkosť spotov pre vlnové dĺžky 200 nm červená, 300 nm modrá a 400 nm zelená. Zobrazená je celá štrbina pomocou druhého poľa

V systéme sa používajú parabolické zrkadlá, ktoré by mali potláčať sférickú vadu, ako vidno na obrázku 5.4 je táto vada pre 300 nm úplne potlačená pre osový zväzok. Pre



Obr. 5.6: Znázornenie rozlíšenia pre centrálnu vlnovú dĺžku.

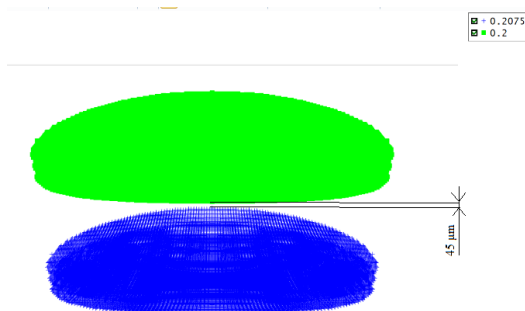
mimosový zväzok máme prítomnú veľkú komu, ktorá je spôsobená rozdielnym miestom dopadov svetelných paprskov pre rôzne vlnové dĺžky. Koma nie len že rozmazáva obraz ale aj posúva disperziu. Veľkosť obrazu je síce správna v smere x ale v smere y ktorý je pre nás z hľadiska analýzy dôležitejší je väčšina rozmazania smerujúca ku kratším vlnovým dĺžkam. Pre okrajové vlnové dĺžky je najznejšou vadou je astigmatizmus, ktorý natahuje obraz do šírky.

Pre spektrometer je najdôležitejší údaj jeho rozlíšenia. Spektrometer bol optimalizovaný pre centrálnu vlnovú dĺžku  $\lambda_{cen} = 300$  nm, preto bude aj výkonnosť na tejto vlnovej dĺžke najvyššia.

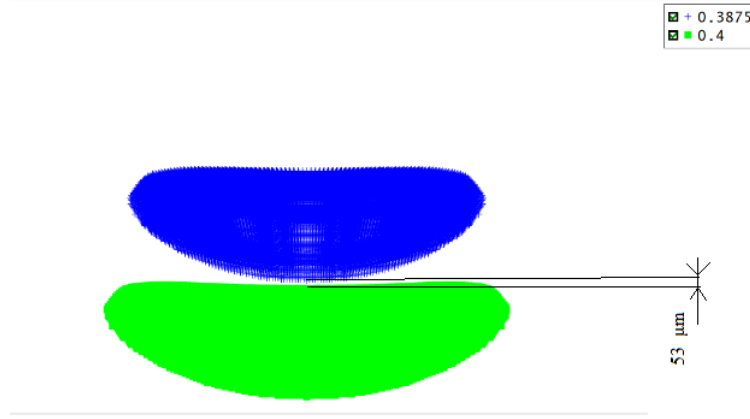
Ako metodiku skúmania rozlíšenia používam podmienku, že na rozlíšenie 2 vlnových dĺžok potrebujem aby sa jedna vlnová dĺžka zobrazila aspoň na 3 pixely, teda aby zaberala  $42 \mu\text{m}$ . Teda potrebujem aby sa rozlíšenie  $1,5$  nm zobrazilo aspoň na  $42 \mu\text{m}$  na detektore.[7]

Z obrázka 5.5 je vidno že rozlíšenie  $1,5\text{nm}$  je skutočne dosiahnuteľné pre optický stred vlnovej dĺžky. Prichádza síce k prekrytiu pre opačné hrany štrbiny čo sa bude ale vidno na detektore sčítaním intenzít.

Rozlišovacia schopnosť spektrometru ale klesá so vzdialenosťou od optickej osi nakoľko aberácie rastú. Na obrázku 5.6 môžeme vidieť že rozlíšenie kleslo až na  $7,5$  nm pre  $200$  nm, teda päťnásobne oproti centrálnej vlnovej dĺžke. Situácia na druhom konci spektra je

Obr. 5.7: Rozlíšenie  $7,5$  nm pre  $200$  nm

veľmi podobná, darí sa rozlíšiť vlnové dĺžky rozdielne až o  $12,5$  nm.



Obr. 5.8: Vlnové dĺžky 387,5 nm a 400 nm

## 5.2. Optimalizácia

Ako bolo spomenuté v časti 5.1, návrh sa odvíjal od návodu od firmy Ibsen Photonics na návrh spektrometru. Ing. Ján Malina ako súčasť svojej práce vytvoril aj výpočtový program, založený na tomto návode. Aj svoj proces optimalizácie som založil na tomto programe.

Ako hlavný vstupný parameter bolo rozlíšenie, ktoré som chcel dosiahnuť. Zvolil som  $\lambda = 0,25 \text{ nm}$ . Nakoľko je ale proces návrhu spektrometru je o kompromisoch, tak som musel zvoliť nároky na spektrálny rozsah. Mriežku a detektor som sa rozhodol použiť tie isté, nakoľko poskytujú dobrú výkonnosť v oblasti ktorá nás zaujíma. Zväčšenie  $M=1$ , lebo so zväčšením rastú aj optické aberácie a teda klesá rozlišovacia schopnosť spektrometru. Potom z rovnice dostávam veľkosť vstupnej štrbiny:

$$w_s = \frac{G\Delta\lambda L_C}{\cos \alpha} = \frac{2421 \cdot 2,5 \cdot 10^{-7} \cdot 49,64}{\cos 21,294} = 32 \text{ } \mu\text{m} \quad (5.3)$$

kde  $L_C$  je ohnisková vzdialenosť kolimačného člena.

$$L_C = L_F \frac{\cos \alpha}{M \cos \beta} = 49,6461 \text{ mm} \quad (5.4)$$

kde  $L_F$  je ohnisková vzdialenosť fokusačného člena.

$$L_F = \frac{\cos \beta L_D}{G \cos (\lambda_{max} - \lambda_{min})} = \frac{25,8 \cdot \cos 21,294}{2421 \cdot 200} = 49.6461 \text{ mm} \quad (5.5)$$

kde  $L_D$  je veľkosť detektoru. Základné charakteristiky spektrometru potom sú:

- Vstupná štrbina:  $w_s = 32 \text{ } \mu\text{m}$
- Numerická apertúra:  $NA = 0,22$
- Maximálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{max} = 350 \text{ nm}$
- Minimálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{min} = 250 \text{ nm}$
- Centrálna vlnová dĺžka:  $\lambda_{cen} = 300 \text{ nm}$

- Výchylka:  $\phi = 0^\circ$
- Perioda mriežky:  $G = 2421$  čiar/mm
- Difrakčný rád:  $k = 1$
- Veľkosť obrazu na čipe:  $w_s = 32 \mu\text{m}$
- Zväčšenie :  $M = 1$

### 5.3. Spektrometer po optimalizácii

Geometria návrhu sa nemenila, proces optimalizácie bol vedený spôsobom zobrať to čo už existuje a skúsiť vymeniť určité komponenty. Konkrétne som vymenil obe zrkadlá. Ako bolo uvedené z výpočtov vyššie, sú potrebné zrkadlá s ohniskovou vzdialenosťou 49,64 mm. Rada TECHSPEC od Edmund optics znova poskytuje zrkadlá s veľmi blízkou hodnotou.[14,15]

#### Kolimačné zrkadlo

Označenie: #37-266

Efektívna ohnisková vzdialenosť: 50,8 mm

Polomer: 6,35 mm

Off-set uhol:  $90^\circ$

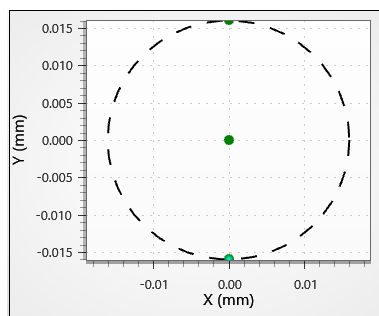
#### Fokusačné zrkadlo

Označenie: #37-233

Efektívna ohnisková vzdialenosť: 50.80 mm

Polomer: 12,70 mm

Off-set uhol:  $90^\circ$



Obr. 5.9: Simulácia  $32 \mu\text{m}$  štrbiny

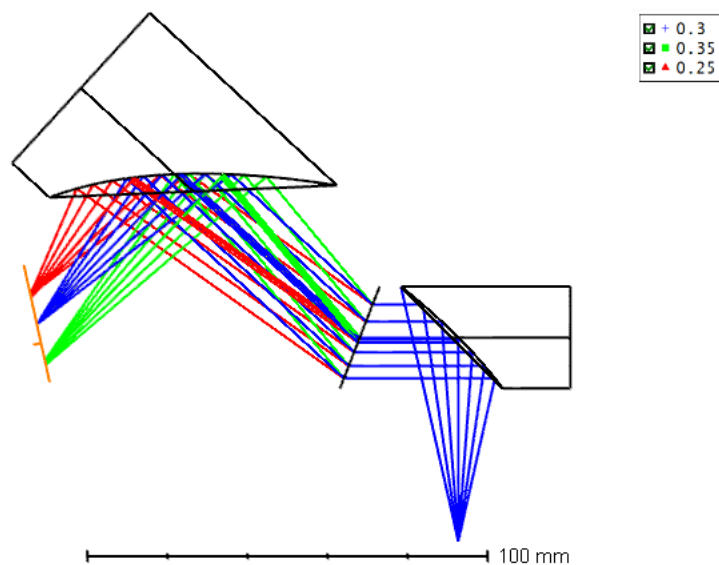
Na obrázku 5.9 je zobrazené rozvrhnutie spektrometra so vstupnou štrbinou, dvoma zrkadlami, difrakčnou mriežkou a detektorom.

Obrázky 5.9 a 5.10 poskytujú predstavu o spotoch pre rôzne vlnové dĺžky. Je vidno že spoty dosahujú niekoľkokrát menšiu veľkosť v predošlej verzii spektrometru, kde som sa so spotmi krajných vlnových dĺžok dostal na veľkosť spotu pre centrálnu vlnovú dĺžku pred optimalizáciou. Koma a sférická vada sú skvelo redukované pre centrálnu vlnovú dĺžku, astigmatizmus stále pretrváva. Koma sa začína ukazovať ďalej pri hraniciach spektra kde, natahuje disperziu ďalej ku dlhším vlnovým dĺžkam.

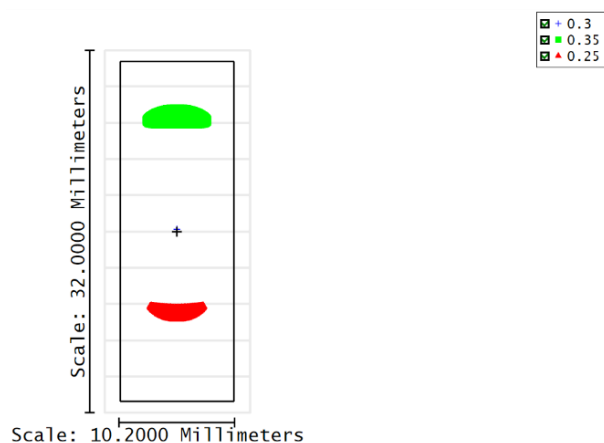


### 5.3. SPEKTROMETER PO OPTIMALIZÁCIÍ

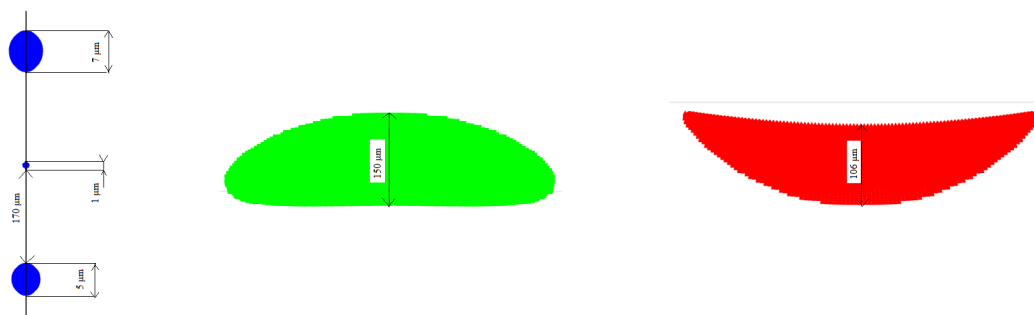
Nepodarilo sa dosiahnúť cieľené rozlíšenie celkom presne, nakoľko by sme na splnenie podmienky potrebovali ešte ďalšie dva mikróny. Je tu ale vidno ako veľmi trpí systém mimo-osovými optickými aberáciami, keď už len malý odklon od asi má na svedomí niekoľko násobné zväčšenie spotov. Veľkosti spotov jednotlivých vlnových dĺžok sa podarilo



Obr. 5.10: Návrh optického zobrazovacieho spektrometru po optimalizácii v sekvenčnom režime Zemaxu



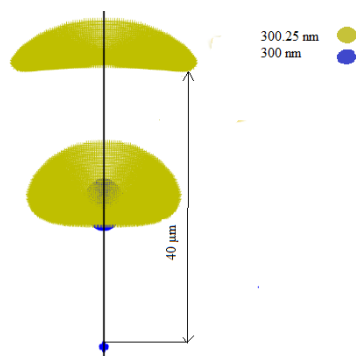
Obr. 5.11: Footprint diagram optimalizovaného spektrometra



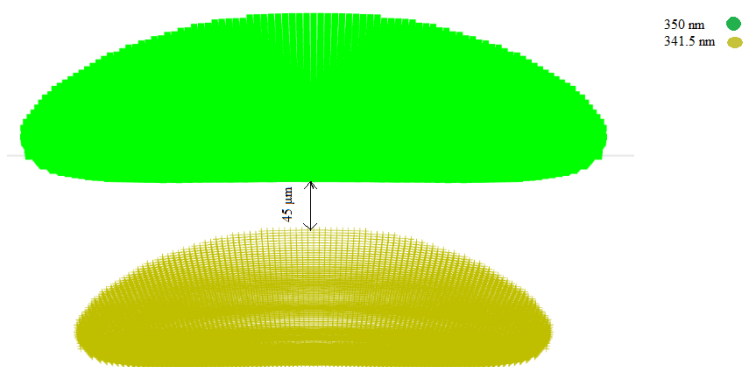
Obr. 5.12: Veľkosť spotov spektrometru po optimalizácii

## 5. OPTIMALIZÁCIA SPEKTROMETRU

mnohonásobne zmenšiť. pre 250 nm z 570 mikro na 106 pre 350, pre 350 zo 156 na 478 mikro

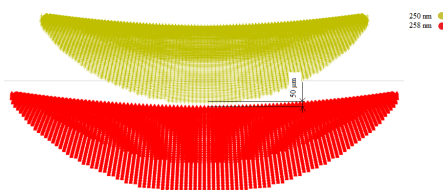


Obr. 5.13: Roslíšnie 0,25 nm pre centrálnu vlnovú dĺžku



Obr. 5.14: Roslíšnie 8,5 nm pre vlnovú dĺžku 350 nm

Situácia na okrajoch spektra je podobná ako v predošlom prípade kde znova dochádza k strate rozlišovacej schopnosti.



Obr. 5.15: Roslíšnie 8 nm pre vlnovú dĺžku 250 nm

Zvýšenie rozlíšenia teda nastalo len pre centrálnu vlnovú dĺžku a to o 600%. Môj systém trpí veľkou citlivosťou na mimoosovosť a to kvôli malým clonovým číslam zrkadiel. V budúcich verziách vývoja bude dôležité dosiahnuť kvalitné rozlíšenie naprieč celým spektrom.

	$\lambda/\text{nm}$	pred optimalizáciou	po optimalizácii	zlepšenie
veľkosti spotov / $\mu\text{m}$	250	570	106	538%
	300	49	1	4900%
	350	478	156	306%
rozlíšenie / nm	250	6,5	8	1,23%
	300	1,5	0,25	600%
	350	7	8,5	1,21%

Obr. 5.16: Porovnanie veľkosti spotov a rozlíšenia spektrometrov. Červené písmo značí zhoršenie

## 6. Mechanický návrh

Nakoľko sa ešte spektrometer nenachádza v stave kedy by bolo možné vytvoriť komerčný pevný produkt, je potrebná flexibilita pre výmenu, pridanie a nastavenie rôznych komponent. Túto flexibilitu umožnia optické dosky v kombinácii na úchyty zrkadiel, difrakčnej mriežky a detektoru od firmy Thorlabs.

### 6.1. Optická doska

Pevná hliníková, nemagnetická platforma poskytuje flexibilný a finančne nenáročný spôsob zostavenia prototypov rôznych optických sústav ako môže byť napríklad spektrometer. [21]

Označenie: MB1515/M

Šírka: 300 mm

Dĺžka: 300 mm

Výška: 12,7 mm

Upevnenie komponentov: Diery M6

### 6.2. Úchyty zrkadiel

Spodná časť zrkadiel obsahuje 3 upevňovacie diery so závitmi M4 na uchytenie do držiaku. Tieto chyty by potom bolo možné upevniť na úchyty s mikroposuvmi na presné doladenie sústavy. [22]

### 6.3. Upevnenie difrakčnej mriežky

Upevnenie difrakčnej mriežky by malo byť ľahko dostupné pre jednoduchú a rýchlu výmenu. Navyše by sa s ním malo dať otáčať pre jednoduchú zmenu spektrálneho rozsahu. Úchyt KM100s od Thorlabs zabezpečí 25.4 mm difrakčnú mriežku proti posunutiu vďaka šróbu ktorý, má na hlave nilónovu vrstvu aby zabránil poškodeniu.[23]



Obr. 6.1: Úchyt difrakčnej mriežky, prevzaté z [23]

## 7. Záver

Práca popisuje proces a výsledky optimalizácie optického zobrazovacieho spektrometru, ktorý bude slúžiť na spektroskopiu laserom budeného plazmatu.

Teoretická časť pozostáva z popisu spektroskopie a neskôr, bližšie analytickej metóde LIBS. V záverečnej teoretickej časti boli popísané optické zobrazovacie spektrometre s popisom jednotlivých častí.

V poslednej časti boli popísané spektrometre pred a po optimalizácií kde boli popísané ako ich komponenty tak aj ich zobrazovacie vlastnosti a porovnanie.

Návrh napriek jednoduchosti a komponentom dosahuje výborné výsledky pre centrálnu vlnovú dĺžku. Ďalšie zlepšenie je možné nájsť na fokusačnom zrkadle kde je potrebné ustriehnuť rozdielnu fokusačnú vzdialenosť pre rôzne vlnové dĺžky.

# Literatúra

- [1] MIZIOLEK, Andrzej W., Vincenzo PALLESCHI a Israel SCHECHTER, ed. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS): fundamentals and applications. New York: Cambridge University Press, 2006. ISBN 05-218-5274-9
- [2] George Samuel Hurst Jack D. Graybeal John Oliver Stoner Steven Chu. ENCYCLOPÆDIA BRITANNICA. (1999). [Online]. [cit. 2021-03-05]. Dostupné z: <https://www.britannica.com/science/spectroscopy>
- [3] Deniz Sahin. Atomic Spectroscopy. (2019). [Online]. [cit. 2021-03-05]. Dostupné z: <https://www.intechopen.com/books/modern-spectroscopic-techniques-and-applications/atomic-spectroscopy>
- [4] Whitehouse, Andrew I. "Laser-Induced Breakdown Spectroscopy and Its Application to the Remote Characterisation of Hazardous Materials." Spectroscopy Europe, 2006, [www.spectroscopyeurope.com/article/laser-induced-breakdown-spectroscopy-and-its-application-remote-characterisation-hazardous.....](http://www.spectroscopyeurope.com/article/laser-induced-breakdown-spectroscopy-and-its-application-remote-characterisation-hazardous.....)
- [5] Anabitarte, F., et al. "Laser-Induced Breakdown Spectroscopy: Fundamentals, Applications, and Challenges." ISRN Spectroscopy, 2012, [www.hindawi.com/journals/isrn/2012/285240](http://www.hindawi.com/journals/isrn/2012/285240).
- [6] Malina, J.: *Návrh kompaktního spektrometru s transmisní mřížkou a posuvným spektrálním rozlišením*. [Diplomová práce.] Brno: VUT, FSI, 2020. 87 s.
- [7] 1. Scheeline A. How to Design a Spectrometer. Applied Spectroscopy. 2017;71(10):2237-2252. doi:10.1177/0003702817720468
- [8] James, J. (2007). Spectrograph Design Fundamentals. Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9780511534799 s
- [9] F. Anabitarte, A. Cobo, J. M. Lopez-Higuera, "Laser-Induced Breakdown Spectroscopy: Fundamentals, Applications, and Challenges", International Scholarly Research Notices, vol. 2012, Article ID 285240, 12 pages, 2012. <https://doi.org/10.5402/2012/285240>
- [10] BOROVSKEÝ, J. Úprava fokusační části stolní sestavy pro laserovou spektroskopii LIBS. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012. 45s. Vedoucí bakalářské práce Mgr. Ota Samek, Dr s 7
- [11] The royal society of chemistry. (2011). Influence of biological degradation and environmental effects on the interpretation of archeological bone samples with laser-induced breakdown spectroscopy. J.Anal.At.Spectom, 1733–1739. <http://dx.doi.org/10.1039/C1JA10057B>
- [12] SuperCam, mars 2021 perseverance misia [Online]. [cit. 2021-04-18] <https://mars.nasa.gov/mars2020/spacecraft/instruments/supercam/for-scientists/>
- [13] Ibsen photonics. Spectrometer Design Guide. [Online]. [cit. 2021-05-18]. Dostupné z: <https://ibsen.com/technology/spectrometer-design-guide/>

- [14] THORLABS. Diffraction Gratings Tutorial. [Online]. [cit. 2021-05-18]. Dostupné z: <https://www.thorlabs.com/tutorials.cfm?tabID=0CA9A8BD-2332-48F8-B01A-7F8BF0C03D4E>
- [15] Fokusačné zrkadlo, Katalog výrobkov Edmund optics. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.edmundoptics.com/p/254mm-dia-x-508mm-efl-uv-enhanced-aluminum-50-90-deg-off-axis-mirror/38588/>
- [16] Kolimačné zrkadlo, Katalog výrobkov Edmund optics. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.edmundoptics.com/p/127mm-dia-x-508mm-efl-uv-enhanced-aluminum-50-90-deg-off-axis-mirror/38572/>
- [17] Difrakčná mřížka, Katalog výrobků Ibsen photonics. [Online]. [cit. 2021-05-5]. Dostupné z: <https://ibsen.com/products/transmission-gratings/spectrometer-gratings/spectrometer-gratings-uv/xuv2421-921-lmm/>
- [18] CCD detektor, Katalog výrobků Hamamatsu. [Online]. [cit. 2021-05-05]. Dostupné z: <https://www.hamamatsu.com/eu/en/product/type/S13256-2048-02/index.html>
- [19] Kolimačné zrkadlo, Katalog výrobkov Edmund optics. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.edmundoptics.com/p/127mm-dia-x-127mm-efl-uv-enhanced-aluminum-50-90-deg-off-axis-mirror/38570/>
- [20] Fokusačné zrkadlo, Katalog výrobkov Edmund optics. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.edmundoptics.com/p/254mm-dia-x-254mm-efl-uv-enhanced-aluminum-50-90-deg-off-axis-mirror/38587/>
- [21] Oprická doska, Katalog výrobkov Thorlabs. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.thorlabs.com/thorproduct.cfm?partnumber=MB3030/M>
- [22] Úchyty zrkadiel, Katalog výrobkov Thorlabs. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: [https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup\\_id=7002](https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup_id=7002)
- [23] Úchyt difračnej mriežky, Katalog výrobkov Thorlabs. [Online]. [cit. 2021-05-01]. Dostupné z: <https://www.thorlabs.com/thorproduct.cfm?partnumber=KM100Sad-image-0>

## 8. Zoznam použitých skratiek a symbolov

$E$	Energia fotónov [eV]
$h$	Planckova konštanta [Js]
$\lambda$	Vlnová dĺžka [nm]
$v$	rýchlosť šírenia vlny [ $ms^{-1}$ ]
$c$	rychlosť elektromagnetického žiarenia vo vákuu [ $ms^{-1}$ ]
$I_{ij}$	Intenzita emisnej čiary [ $Wm^{-2}$ ]
$\Omega$	Vyžarovací uhol [steradián]
$\hbar$	Plancova redukovaná konštanta [Js]
$N$	Počet voľných atómov skúmaného prvku v plazme
$g_i$	Štatistická váha kvantového stavu $i$
$A_{ij}$	Pravdepodobnosť prechodu pre spontánnu emisiu z $i$ na $j$
$\pi$	Pí
$\lambda_{ij}$	Vlnová dĺžka danej emisnej čiary prvku ktorý skúmame [nm]
$Z(T)$	Partričná suma kvantového stavu
$T$	Termodynamická teplota [K]
$E_i$	Energiová úroveň excitácie elektrónov [eV]
$v$	Obrazová vzdialenosť [mm]
$u$	Predmetová vzdialenosť [mm]
$f$	Ohnisková vzdialenosť [mm]
$n$	Index lomu
$\delta_{sfe}$	Longitudiálna sférická aberácia [mm]
$B$	Koeficient sférickej aberácie
$\delta_{colc}$	Priemer kruhu najmenšieho zkreslenia [mm]
$\Delta_{coma}$	Tangenciálna koma [mm]
$F$	Koeficniet komy
$D$	Koeficient astigmatizmu

## 8. ZOZNAM POUŽITÝCH SKRATIEK A SYMBOLOV

a	Vzdialenosť vrypov na mriežke [ $\mu m$ ]
m	Difrakčný rád
$w_s$	Vstupná štrbina [ $\mu m$ ]
$w_f$	Veľkosť obrazu na čipe [ $\mu m$ ]
NA	Numerická apertura
M	Zväčšenie
$\Phi$	Výchylka [ $^{\circ}$ ]
G	Perioda mriežky [čiara/mm]